

LÍLIAN CRISTINA CÔCCO

**APLICAÇÃO DE REDES NEURONAIS ARTIFICIAIS PARA
PREVISÃO DE PROPRIEDADES DA GASOLINA A PARTIR DE SUA
COMPOSIÇÃO QUÍMICA**

**Dissertação apresentada como requisito
parcial à obtenção do grau de Mestre em
Processos Químicos, Programa
Interdisciplinar de Pós-Graduação em
Engenharia de Materiais e Processos,
Setor de Tecnologia, Universidade
Federal do Paraná.**

**Orientador: Prof. Dr. Carlos Itsuo
Yamamoto**

**Co-orientador: Prof. Dr. Oscar Felipe
von Meien**

CURITIBA

2003

Dedico este trabalho aos meus filhos Denis e Cristian,
estímulos de minha vida, esperanças de um grande
amanhã.

Agradeço:

A meu querido Deus, que me mostra a melhor face da vida, não importando o caminho a ser percorrido...

Às minhas queridas crianças, que através da inocência me impulsionam para a simplicidade da vida...

À minha querida família, que me estimula ao autoconhecimento constante...

Aos meus queridos professores, que me moldam à pureza da ciência ...

Aos meus queridos amigos, inúmeros como as estrelas de uma constelação, contribuindo cada um com sua luz própria, para o fortalecimento de minha própria luz...

À Agência Nacional do Petróleo pelo fomento da bolsa de mestrado...

Ao projeto CTPETRO/FINEP pelo suporte financeiro para aquisição dos equipamentos envolvidos neste estudo...

Ao Laboratório de Análises de Combustíveis Automotivos pela infra-estrutura oferecida e pelo incentivo ao desenvolvimento deste estudo...

Muito Obrigado.

Recebei as minhas instruções com maior gosto do que se recebêsseis dinheiro; preferi
a ciência ao ouro.

Porque vale mais a sabedoria do que todas as riquezas do mais subido valor, e tudo
quanto é apetecível não se pode comparar com ela.

(PROV, 8, 10-11)

PUBLICAÇÕES

CÔCCO, LÍlian Cristina; YAMAMOTO, Carlos Itsuo; von MEIEN, Oscar Felipe. Previsão de Propriedades da Gasolina a partir de sua Composição Química utilizando-se Rede Neural. in: **II Encontro dos Programas de Recursos Humanos em Petróleo e Gás Natural do Paraná**. 31 de outubro de 2002, Curitiba.

II CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS NATURAL (2 : 2003 : Rio de Janeiro) Prediction of Gasoline Properties from its Chemical Composition and using Artificial Neural Networks. Rio de Janeiro, 2003.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	xi
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS	xii
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvi
1 INTRODUÇÃO	1
2 REVISÃO DE LITERATURA	6
2.1 MÉTODOS ANALÍTICOS UTILIZADOS NA IDENTIFICAÇÃO COMPOSICIONAL DE COMBUSTÍVEIS.....	6
2.2 REDES NEURONAIS ARTIFICIAIS	6
2.2.1 Introdução	8
2.2.2 Rede Neuronal Artificial por Retropropagação.....	11
2.2.3 Parâmetros da Rede por Retropropagação.....	15
2.2.4 O Algoritmo “Backpropagation”.....	21
2.2.5 Outros Tipos de Algoritmos e Redes Neurais	24
2.3 QUÍMICA ANALÍTICA ASSOCIADA AO USO DE REDE NEURONAL POR RETROPROPOGAÇÃO	25
2.4 CONSIDERAÇÕES PARA UTILIZAÇÃO DE REDE NEURONAL POR RETROPROPOGAÇÃO.....	31
3 TEORIA ESTATÍSTICA E METROLOGIA	35
4 MATERIAIS E MÉTODOS	38
4.1 PROGRAMA DE REDE NEURONAL.....	38
4.2 CROMATOGRAFIA GASOSA COM DETECTOR DE IONIZAÇÃO DE CHAMA	38
4.2.1 Composição Química da Gasolina	38
4.2.2 Análise PIANO	39
4.2.3 Condições Cromatográficas e Equipamento	39
4.2.4 Software DHA: Detailed Hydrocarbon Analysis	40
4.3 AMOSTRAS.....	43
4.4 ENSAIOS ASTM E NBR.....	44
4.4.1 Densidade Relativa a 20°C – Método do Densímetro Automático	44
4.4.2 Pressão de Vapor Reid – Método Mini	44
4.4.3 Curva de Destilação – Método da Destilação Atmosférica.....	46
4.4.3.1 Terminologia (NBR 9619).....	46
4.4.3.2 Descrição Sucinta do Ensaio	47
4.4.3.3 Relevância do Ensaio.....	47
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	50
5.1 ESTUDO PRELIMINAR DAS VARIÁVEIS ENVOLVIDAS.....	50
5.2 ESCOLHA DAS AMOSTRAS.....	57
5.3 METROLOGIA E CALIBRAÇÃO DOS EQUIPAMENTOS	59
5.3.1 Calibração do Programa DHA.....	59
5.3.2 Calibração do Densímetro Automático	59

5.3.3	Verificação da Confiabilidade de Calibração do Aparelho de Pressão de Vapor	60
5.3.4	Calibração dos Destiladores Automáticos	61
5.3.5	Repetitividade do DHA	61
5.3.6	Repetitividade do Densímetro Automático	64
5.3.7	Repetitividade do Aparelho de Pressão de Vapor	65
5.3.8	Repetitividade dos Destiladores Automáticos	66
5.3.9	Reprodutibilidade dos Destiladores Automáticos	68
5.4	REDE NEURONAL	70
5.5	ANÁLISE CROMATOGRÁFICA E PROGRAMA DHA	71
5.6	PREVISÃO DA DENSIDADE RELATIVA A 20°C	72
5.7	PREVISÃO DA PRESSÃO DE VAPOR REID	77
5.8	PREVISÃO DA CURVA DE DESTILAÇÃO ASTM	81
5.8.1	Ponto Inicial de Ebulição	81
5.8.2	Curva de Destilação (T_{10})	85
5.8.3	Curva de Destilação (T_{50})	88
5.8.4	Curva de Destilação(T_{90})	91
5.8.5	Ponto Final de Ebulição	95
6	CONCLUSÃO	100
7	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	101
	REFERÊNCIAS	101
	APÊNDICES	106

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 – TIPOS DE REDES NEURONAIS ARTIFICIAIS	09
FIGURA 2.2 – ESQUEMA DE UMA REDE NEURONAL ARTIFICIAL	11
FIGURA 2.3 – ARQUITETURA DE REDE POR RETROPROPAGAÇÃO	13
FIGURA 2.4 – ILUSTRAÇÃO DE DOIS SINAIS FLUINDO EM UM PERCEPTRON MULTICAMADAS.....	14
FIGURA 2.5 – FUNÇÃO SIGMOIDAL	15
FIGURA 2.6 – FUNÇÃO TANSIG	16
FIGURA 2.7 – FUNÇÃO LINEAR	16
FIGURA 2.8 - EFEITO DA VARIAÇÃO DO PARÂMETRO θ EM UMA FUNÇÃO SIGMOIDAL.....	17
FIGURA 2.9 – SUPERFÍCIE DO ERRO COMO FUNÇÃO DE UM PESO.....	18
FIGURA 2.10 – REGIÃO DOS DADOS DE ENTRADA PARA UMA FUNÇÃO DE TRANSFERÊNCIA.....	20
FIGURA 2.11 – ARQUITETURA DE REDE NEURONAL HOPFIELD.....	25
FIGURA 4.1 – CROMATÓGRAFO CG – FID.....	40
FIGURA 4.2 – IROX 2000	43
FIGURA 4.3 – DENSÍMETRO DIGITAL	44
FIGURA 4.4 – APARELHO MEDIDOR DE PRESSÃO DE VAPOR	45
FIGURA 4.5 – DESTILADORES AUTOMÁTICOS	46
FIGURA 4.6 – CURVA DE DESTILAÇÃO DE UMA GASOLINA COMUM	48
FIGURA 5.1 – VARIAÇÃO DO TEOR DE ETANOL NA GASOLINA COMUM – PARANÁ JAN-NOV 2001.....	51
FIGURA 5.2 - VARIAÇÃO DO TEOR DE AROMÁTICOS NA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	52
FIGURA 5.3 - VARIAÇÃO DO TEOR DE OLEFÍNICOS NA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	52
FIGURA 5.4 - VARIAÇÃO DO TEOR DE SATURADOS NA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	53
FIGURA 5.5 - VARIAÇÃO DA DENSIDADE RELATIVA A 20 °C DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	54
FIGURA 5.6 - VARIAÇÃO DO T_{10} DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	55
FIGURA 5.7 - VARIAÇÃO DO T_{50} DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	55
FIGURA 5.8 - VARIAÇÃO DO T_{90} DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	56
FIGURA 5.9 - VARIAÇÃO DO PFE DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001	57
FIGURA 5.10 – CROMATOGRAMA TÍPICO DE UMA GASOLINA COMUM	71
FIGURA 5.11 - ARQUITETURA DA MELHOR REDE OBTIDA PARA PREVISÃO DE DENSIDADE	75
FIGURA 5.12 - DENSIDADE EXPERIMENTAL X DENSIDADE CALCULADA PELA REDE COMPLEXA	76

FIGURA 5.13 – DENSIDADE EXPERIMENTAL x DENSIDADE CALCULADA PELA REDE SIMPLES.	76
FIGURA 5.14 - DESVIOS DE PREVISÃO DE DENSIDADE PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	77
FIGURA 5.15 – DESVIOS DE PREVISÃO DE DENSIDADE PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	77
FIGURA 5.16 - PV REID EXPERIMENTAL X PV REID CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.	79
FIGURA 5.17 – PV REID EXPERIMENTAL x PV REID CALCULADO PELA REDE SIMPLES.	80
FIGURA 5.18 - DESVIOS DE PREVISÃO DE PV REID PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	81
FIGURA 5.19 – DESVIOS DE PREVISÃO DE PV REID PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	81
FIGURA 5.20 - PIE EXPERIMENTAL X PIE CALCULADO PELA REDE COMPLEXA	83
FIGURA 5.21 – PIE EXPERIMENTAL x PIE CALCULADO PELA REDE SIMPLES.	83
FIGURA 5.22 - DESVIOS DE PREVISÃO DE PIE PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	84
FIGURA 5.23 – DESVIOS DE PREVISÃO DE PIE PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	84
FIGURA 5.24 - T_{10} EXPERIMENTAL X T_{10} CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.	86
FIGURA 5.25 – T_{10} EXPERIMENTAL x T_{10} CALCULADO PELA REDE SIMPLES.	86
FIGURA 5.26 - DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{10} PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	87
FIGURA 5.27 – DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{10} PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	87
FIGURA 5.28 - T_{50} EXPERIMENTAL X T_{50} CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.	89
FIGURA 5.29 – T_{50} EXPERIMENTAL x T_{50} CALCULADO PELA REDE SIMPLES.	89
FIGURA 5.30 - DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{50} PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	90
FIGURA 5.31 – DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{50} PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	90
FIGURA 5.32 - T_{90} EXPERIMENTAL X T_{90} CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.	93
FIGURA 5.33 – T_{90} EXPERIMENTAL x T_{90} CALCULADO PELA REDE SIMPLES.	93

FIGURA 5.34 - DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{90} PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	94
FIGURA 5.35 – DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{90} PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	94
FIGURA 5.36 - PFE EXPERIMENTAL X PFE CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.	96
FIGURA 5.37 – PFE EXPERIMENTAL x PFE CALCULADO PELA REDE SIMPLES.	97
FIGURA 5.38 - DESVIOS DE PREVISÃO DE PFE PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.....	97
FIGURA 5.39 – DESVIOS DE PREVISÃO DE PFE PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.....	98

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1 – COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO DA PREVISÃO DE BRON PARA DADOS DE TESTE	27
TABELA 2.2 – PREVISÃO PARA NÚMERO DE CETANAS DO DIESEL	30
TABELA 2.3 – PREVISÃO PARA DENSIDADE DO DIESEL	30
TABELA 2.4 - OUTROS TRABALHOS UTILIZANDO REDES NEURONAIS ARTIFICIAIS.....	30
TABELA 5.1. - LEITURAS DE PRESSÃO DE VAPOR PARA VERIFICAÇÃO DO APARELHO.....	60
TABELA 5.2 - TESTE DE REPETITIVIDADE DA CROMATOGRAFIA COM DHA PARA GASOLINA COMUM	62
TABELA 5.3 – CÁLCULO DA INCERTEZA DE MEDIÇÃO PARA DHA	63
TABELA 5.4 – LEITURAS DE DENSIDADE DA GASOLINA COMUM PARA TESTE DE REPETITIVIDADE	64
TABELA 5.5 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO PARA O DENSÍMETRO AUTOMÁTICO	65
TABELA 5.6 – LEITURAS DE PRESSÃO DE VAPOR REID PARA TESTE DE REPETITIVIDADE.....	65
TABELA 5.7 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO PARA O APARELHO DE PRESSÃO DE VAPOR.....	65
TABELA 5.8 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 1	66
TABELA 5.9 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 1	66
TABELA 5.10 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 2.....	67
TABELA 5.11 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 2	67
TABELA 5.12 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 3.....	67
TABELA 5.13 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 3	67
TABELA 5.14 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 4.....	68
TABELA 5.15 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 4	68
TABELA 5.16 - LEITURAS PARA TESTE DE REPRODUTIBILIDADE DOS DESTILADORES.....	69
TABELA 5.17 - TESTE DE REPRODUTIBILIDADE ENTRE OS DESTILADORES	69
TABELA 5.18 – COMPARAÇÃO DAS INCERTEZAS DE MEDIÇÃO ENTRE OS DESTILADORES AUTOMÁTICOS	70
TABELA 5.19 – RESUMO DOS DESVIOS DE PREVISÃO PARA O CONJUNTO DE TESTE DAS REDES NEURONAIS PARA CADA PROPRIEDADE ESTUDADA.....	99

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

ASTM – American Society for Testing and Materials.

BP – Backpropagation.

BRON – Blending Research Octane Number.

CG – Cromatografia gasosa.

CG – MS - Gas Chromatography with Mass Spectrometer

DHA – Detailed Hydrocarbon Analysis.

E – Erro quadrático de treinamento.

F(n) – Função de transferência.

FID – Flame Ionization Detector.

GA – Genetic Algorithm.

GC – Gas Chromatography.

HPLC – High Pressure Liquid Chromatography.

IV – Infravermelho.

LACAUT – Laboratório de Análises de Combustíveis Automotivos.

LI – Limite inferior do intervalo de normalização.

LS – Limite superior do intervalo de normalização.

m – Número da iteração.

M – Número de neurônios da camada oculta.

MIR – Infravermelho médio.

MLR – Multiple Linear Regression.

MON – Motor Octane Number.

n – Número de observações.

N – Número de variáveis de entrada.

NBR - Norma Brasileira.

NP – Número de pontos do conjunto de treinamento.

o – Valor previsto pela rede.

P – Número de saídas da rede neuronal.

PCA – Principal Component Analysis.

PCR – Principal Component Regression.

PFE – Ponto Final de Ebulição.

PIANO – Análise de parafínicos, isoparafínicos, aromáticos, naftênicos e olefínicos.

PIE – Ponto Inicial de Ebulição.

PLS – Partial Least Square.

PNA – Análise de parafínicos, naftênicos e aromáticos.

PONA – Análise de parafínicos, olefínicos, naftênicos e aromáticos.

PPReg – Projection Pursuit Regression.

R – Coeficiente de correlação.

RMN ^{13}C – Ressonância magnética nuclear de carbono 13.

RMN ^1H – Ressonância magnética nuclear de hidrogênio.

RNA – Rede neuronal artificial.

RON – Research Octane Number.

s – Desvio padrão.

T_{10} – Temperatura na qual 10% do volume inicial de gasolina foi destilado.

T_{50} – Temperatura na qual 50% do volume inicial de gasolina foi destilado.

T_{90} – Temperatura na qual 90% do volume inicial de gasolina foi destilado.

UV – Ultravioleta.

VA – Valor atual.

$V_{\text{máx.}}$ – Máximo valor dos dados de entrada.

$V_{\text{mín.}}$ – Mínimo valor dos dados de entrada.

VN – Valor normalizado.

W – Pesos sinápticos.

X – Variável de entrada.

y – Valor experimental.

\bar{x} – Média aritmética.

α - Constante de proporcionalidade.

η – Fator de aprendizado ou treinamento.

θ – Bias.

Sub índices:

α - Nível de significância estatística.

i, j – camada da rede.

RESUMO

As propriedades físico-químicas da gasolina são importantes referências de sua qualidade, devendo ser monitoradas a fim de mantê-la, respeitando-se leis ambientais e parâmetros técnicos. Cada propriedade é, em geral, uma complicada função da composição química da gasolina, podendo ser representada por diversos tipos de correlações matemáticas. Correlações matemáticas são utilizadas por equipamentos como o espectrômetro por infravermelho para a previsão de propriedades físico-químicas de combustíveis a partir da análise do espectro obtido, com objetivo de reduzir o custo de implantação de laboratórios para controle da qualidade de combustíveis. Por outro lado, as correlações existentes não estão ajustadas à gasolina brasileira, cuja composição química é modificada com a adição de álcool etílico anidro, fornecendo resultados não condizentes com a realidade. Por este motivo existe a necessidade de se encontrar correlações apropriadas para a gasolina nacional e aplicá-las para obtenção de previsões mais acuradas, com valores próximos às análises experimentais padrão ASTM e NBR, adotadas pela Agência Nacional do Petróleo como referências de qualidade para a gasolina brasileira. Este trabalho descreve a utilização de redes neurais artificiais como um método de correlação para previsão de algumas propriedades importantes da gasolina, tais como: curva de destilação, densidade relativa a 20°C e pressão de vapor Reid. Uma rede com treinamento supervisionado por retropropagação é usada neste trabalho. Após estudos preliminares e planejamento experimental, 35 amostras de gasolina brasileira, de um universo de 1000 amostras analisadas no LACAUT (Laboratório de Análises de Combustíveis Automotivos), coletadas em postos de combustíveis no estado do Paraná, foram escolhidas e submetidas à análise cromatográfica e ensaios laboratoriais padronizados. Um programa específico para classificação de hidrocarbonetos denominado DHA (Detailed Hydrocarbon Analysis) gerou dados de entrada para a rede neuronal, enquanto que os ensaios físico-químicos padronizados forneceram os dados de saída. A capacidade preditiva das redes obtidas foi muito boa para as propriedades estudadas, compatível com a precisão das medidas experimentais. Os desvios obtidos ficaram em média próximos de 1%. Os resultados alcançados estão próximos das faixas de incerteza de medição dos ensaios físico-químicos e comprovam que a ferramenta utilizada consegue correlacionar adequadamente a composição química e as propriedades físico-químicas estudadas.

Palavras-chave: gasolina; rede neuronal; retropropagação, cromatografia gasosa.

ABSTRACT

The fuel physic-chemical properties are very important references of its quality. They must be monitored in order to maintain and/or improve production quality and match environmental standards as well. Each property is, in general, a complicated function of the chemical composition of the gasoline, being able to be represented by several types of mathematical correlations. Mathematical correlations are used by equipment as the infrared spectrometer for the prediction of physic-chemical properties of fuel. The perspective is the reduction of cost of laboratory implantation. On the other hand, the existing correlations are not adjusted to the Brazilian gasoline, whose chemical composition is modified with the anhydrous ethyl alcohol addition, supplying results not agreeable with the reality. For this reason it is necessary to find appropriate correlations and apply them to forecast values near to the experimental analyses standard ASTM and NBR, adopted for the National Agency of the Oil as references of quality for the Brazilian gasoline. This work describes the use of artificial neural networks as a method of correlation for forecasting of some important properties of the gasoline, such as: curve of distillation, relative density 20°C and pressure Reid vapor. A network with supervised learning with backpropagation algorithm is used in this work. After preliminary studies and experimental planning, 35 samples of Brazilian gasoline, from the universe of 1000 samples analyzed in the LACAUT (Laboratory of Fuel Analyses), collected in the state of the Paraná, had been chosen and submitted to the chromatographic analysis and standardized laboratories assays. A specific program for classification of hydrocarbons, the DHA (Detailed Hydrocarbon Analysis), generated the input data for the neural network, while standardized physic-chemical had supplied the output data. The predictive capacity of the obtained nets was very good for the studied properties, within the experimental accuracy. The obtained error had been in average next to 1%. The reached results are next to the bands of measurement uncertainty of the physic-chemical experiments. It proves that the used tool obtains the correlation from chemical composition and the studied physic-chemical properties.

KEYWORDS: gasoline, neural networks, backpropagation, gas chromatography.

1 INTRODUÇÃO

Uma tentativa de redução dos custos laboratoriais é a utilização de correlações matemáticas em infravermelhos portáteis, que podem prever, a partir do espectro gerado, propriedades da gasolina. Estão sendo aplicadas principalmente para previsão de MON (Motor Octane Number) e RON (Research Octane Number), que são propriedades ligadas à qualidade antidetonante da gasolina. Os ensaios experimentais de MON e RON são demorados e de difícil execução, além de possuírem alto custo de investimento. Outras propriedades também são previstas através de correlações, tais como Pressão de vapor Reid e Curva de Destilação, porém as previsões obtidas com as correlações existentes fornecem resultados não condizentes com a realidade. Isso se deve ao fato de não estarem ajustadas à gasolina nacional, que recebe uma quantidade apreciável de álcool etílico anidro, alterando significativamente a composição química e conseqüentemente suas propriedades. A adição de oxigenados à gasolina tem a principal finalidade de reduzir emissões tóxicas, sendo que no Brasil, essa adição adquire um caráter político e logístico. Por este motivo observou-se a necessidade de encontrar novas correlações matemáticas, ajustadas à gasolina nacional, para que a previsão de suas propriedades físico-químicas esteja próxima aos valores obtidos em ensaios experimentais padrão ASTM ou NBR.

Para a montagem das correlações, utilizam-se dados gerados por qualquer técnica analítica de identificação, tais como espectrometria por infravermelho, ultravioleta ou de massa atômica, espectrometria de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ^1H) ou carbono 13 (RMN ^{13}C) e cromatografia gasosa e líquida, como dados de entrada. Os ensaios padrão, como densidade a 20°C e curva de destilação da gasolina, fornecem os dados de saída para posterior aplicação em um método de regressão de dados. O método matemático deve ser capaz de encontrar a relação existente entre as entradas e saídas, obtendo-se desta forma as correlações desejadas. Em resumo, para o desenvolvimento deste tipo de trabalho existe a necessidade da escolha de um método analítico confiável e um tipo de regressão de dados.

Comparando-se com as técnicas analíticas mais avançadas para identificação de compostos, como a ressonância magnética nuclear e espectrometria de massa atômica, a cromatografia gasosa com detector de ionização de chama destaca-se pela facilidade de interpretação dos cromatogramas gerados. É uma técnica extensamente estudada na indústria do petróleo, o que a torna uma análise clássica para hidrocarbonetos. Concentrações mínimas de compostos pertencentes à gasolina são detectados a partir de pequenos volumes injetados de amostra, com excelente separação dos picos, não ocorrendo superposição de compostos como normalmente ocorre ao utilizar as técnicas de infravermelho e ultravioleta. Considerando-se esses diferenciais escolheu-se a técnica da cromatografia gasosa para identificação química da gasolina.

O equipamento disponível, um CG-FID - Varian CP 3800, automático e com coluna capilar, permite fixar condições de trabalho com alta resolução e repetitividade. O programa Star DHA (“Detailed Hydrocarbon Analysis”) da Varian adquirido com o equipamento, proporciona uma identificação qualitativa muito boa, permitindo a identificação de aproximadamente 300 substâncias presentes na nafta e classificação das mesmas em grupos principais. Esta técnica de identificação fornece diretamente a proporção de cada composto presente na gasolina, o que difere das outras tais como espectrometria por infravermelho e ultravioleta, que são mais indicados para a identificação de grupos químicos.

Os dados de saída para o método de regressão são formados pelas propriedades da gasolina, que foram escolhidas conforme a disponibilidade de equipamentos para realização dos ensaios em laboratório: densidade relativa a 20°C, curva de destilação e pressão de vapor Reid.

Escolhida a técnica para identificação da composição química para fornecer os dados de entrada e fixados os dados de saída, passa-se à escolha do método de regressão de dados. Existem diversas técnicas de regressão e a mais utilizada é a regressão linear múltipla. Este modelo é representado pela equação:

$$Y = X.B \quad (1)$$

Onde:

Y = matriz $[n \times m]$ de variáveis dependentes

n = número de amostras

m = número de variáveis dependentes (por exemplo as propriedades físico-químicas da gasolina).

X = matriz $[n \times k]$ de variáveis independentes

k = número de variáveis independentes (composição química).

B = matriz $[k \times m]$ dos coeficientes de regressão (GEMPERLINE, 1992, p. 117).

Um modelo linear é assumido para relacionar a matriz X com a matriz Y . O objetivo deste tipo de modelo é achar a matriz B através de algoritmos diferenciados. Um dos mais utilizados é o PLS (partial least squares) ou regressão dos mínimos quadrados. O PLS possui capacidade de modelar respostas não lineares pela inclusão de variáveis latentes no modelo (GEMPERLINE, 1992, p. 116). Outro exemplo de algoritmo é o PLS-polinomial (ANDRADE; SÁNCHEZ; SARABIA, 1999), o qual considera a relação intrínseca como um polinômio quadrático, cúbico, etc. Neste tipo de regressão dois parâmetros são ajustados: a ordem do polinômio e o número de variáveis latentes do modelo PLS. Outro algoritmo muito utilizado é o PCA (principal component analysis) ou PCR (principal component regression). A regressão do componente principal é um método que transforma as variáveis originais em novas variáveis, chamadas componentes principais (LAVINE et al., 2001, p. 240). Cada componente principal é uma combinação linear das variáveis originais. O maior componente principal é identificado determinando-se a direção da maior variação nos dados, modelando-o por uma linha que atravessa o centro dos dados. O segundo maior componente segue a direção da segunda maior variação e também passa através do centro dos dados mas é ortogonal ao primeiro componente principal. O terceiro maior componente principal segue a terceira maior variação, passando pelo centro dos dados e sendo ortogonal aos outros dois e assim por diante. Ao utilizar o PCA, as variáveis originais, constituídas em um sistema axial correlacionado, podem ser convertidas em um sistema ortogonal que remove a correlação forçando os novos eixos a serem

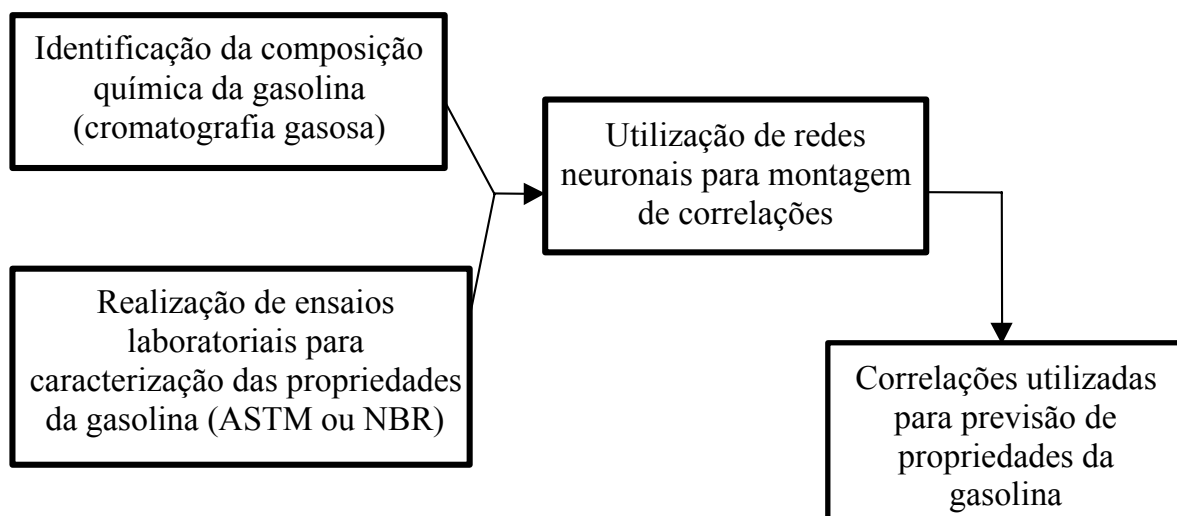
independentes. Isto reduz dramaticamente a dimensão do conjunto de dados porque apenas poucos eixos independentes são necessários para representar os seus valores. Este tipo de algoritmo é rotineiramente utilizado em dados que se deseja redução dimensional, para classificação de amostras e identificação de “outliers”. Um outlier é um dado que fornece informação errada devido a um grande erro experimental.

Outro método de regressão de dados são as chamadas redes neuronais artificiais (RNAs), um tipo de estrutura matemática que é capaz de implementar padrões de associações, desenvolvendo automaticamente modelos implícitos, o que difere dos métodos clássicos de regressão onde existe a necessidade de um modelo explícito gerado analiticamente do sistema sob estudo. Têm sido extensamente estudadas, teórica e experimentalmente, com vastas aplicações na área da química. A utilização de redes neuronais, possui grande potencialidade de aplicação prática, principalmente em processos onde os modelos fenomenológicos não são conhecidos ou não podem ser desenvolvidos facilmente.

Levando-se em conta que as redes neuronais não necessitam de um modelo matemático para iniciar o estudo, apenas de dados de entrada e saída os quais se supõe que exista relação entre eles, optou-se por este método de regressão de dados. Uma rede neuronal por retropropagação foi escolhida por ser a mais utilizada para este tipo de estudo, além de ser a mais simples com relação aos outros tipos de redes neuronais existentes. A grande quantidade de artigos com aplicações na química analítica ou em processos químicos, fornece uma exemplificação necessária para uma aplicação mais direta desta ferramenta matemática.

Para a aplicação de redes neuronais, bem como qualquer tipo de regressão de dados, os resultados obtidos são influenciados principalmente pela qualidade dos dados retirados para o estudo, já que dados não confiáveis inseridos dentro do conjunto podem atrapalhar o ajuste. Para obter dados de boa qualidade deve-se observar a calibração e manutenção periódica de equipamentos, confiabilidade na medição de variáveis, cálculo de incertezas e planejamento experimental para seleção de amostras.

Um esquema simplificado do estudo está apresentado a seguir:



Este estudo pode simplificar a determinação das propriedades físico-químicas da gasolina, sem que haja necessidade da realização dos ensaios laboratoriais para sua caracterização, determinando-se apenas sua composição química através de cromatografia gasosa. Isto quer dizer que, com apenas um ensaio cromatográfico é possível prever o resultado dos demais ensaios padronizados. Este estudo pode ser estendido às refinarias para previsão de outras propriedades que se consideram importantes, tais com MON e RON, desde que os cuidados necessários para uma regressão de dados sejam tomados e se aplique o método de identificação química apropriado.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 MÉTODOS ANALÍTICOS UTILIZADOS NA IDENTIFICAÇÃO COMPOSICIONAL DE COMBUSTÍVEIS

A química analítica tem desenvolvido diversas ferramentas que fornecem informações sobre a composição química dos combustíveis. Trabalhos na área de espectrometria no infravermelho (IV) são atrativos devido ao curto tempo de análise. O princípio básico da técnica é a radiação infravermelha, que quando absorvida por uma molécula, converte-se em energia de vibração molecular (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994, cap. 3). As vibrações moleculares formam um espectro devido à deformações axiais e angulares. A posição exata da banda de absorção e a mudança nos contornos das bandas revelam detalhes importantes da estrutura, porém uma molécula simples pode gerar um espectro complexo. IOB et al. (1995) utilizaram espectrometria no infravermelho para determinar a composição de 33 amostras de gasolina preparadas. Em um estudo posterior (1998), utilizaram a mesma técnica de análise para determinar o teor de oxigenados em outras 102 amostras preparadas em laboratório. LITANI-BARZILAI et al. (1997) utilizaram espectrometria no infravermelho próximo (NIR) com 325 amostras de gasolina determinando-se sua composição química e ANDRADE, MUNIATEGUI e PRADA (1997) também utilizaram o infravermelho médio (MIR) em 310 amostras de nafta com alguns problemas para diferenciação entre naftas que classificou-se como sendo do tipo A e B. A diferenciação das naftas está na quantidade de aromáticos presentes, sendo que a nafta do tipo A possui baixa quantidade de aromáticos enquanto que a nafta do tipo B, mais comum que a outra, possui alto teor de aromáticos.

Trabalhos desenvolvidos em espectrometria no ultravioleta (UV) também podem ser interessantes devido ao curto tempo de análise, porém não foi encontrado nenhum que pudesse fornecer uma identificação de algum tipo de combustível. O princípio básico da espectrometria no ultravioleta é a absorção de energia na região do ultravioleta que depende da estrutura eletrônica da molécula. Essa absorção de energia é quantizada e conduz à passagem dos elétrons de orbitais do estado fundamental para

orbitais de maior energia em um estado excitado. Com isto pode-se reconhecer grupos característicos através dos espectros gerados. Porém podem existir espectros de moléculas simples semelhante ao de complexas (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994, cap. 7). Talvez devido a esse tipo de complexidade os trabalhos nesta área são raros.

Raros também são os trabalhos realizados com a técnica de espectrometria de massa atômica. O princípio desta técnica é o bombardeio das moléculas na fase vapor por elétrons com alta energia. O impacto dos elétrons na molécula gera fragmentos de moléculas e suas massas atômicas são quantificadas através de um espectro de íons (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994, cap. 2). Para identificação de compostos é necessário que se tenha conhecimentos profundos em química orgânica e uma análise detalhada do espectro gerado.

Outro tipo de análise é a espectrometria de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ^1H) ou carbono 13 (RMN ^{13}C), semelhante às outras formas de espectrometria de absorção (IV e UV), cujo princípio básico é a absorção de radiação eletromagnética na região de radiofrequência, sob condições apropriadas em um campo magnético. Características estruturais da amostra geram um espectro de frequências dos picos de absorção contra suas intensidades (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994, cap. 4 e 5). Existem estudos publicados utilizando-se esta técnica para identificação da composição química da gasolina, dentre os quais pode-se citar: MEUSINGER e MOROS (1999b) que trabalharam com RMN ^1H para determinar o teor de oxigenados, parafinas, olefinas, naftênicos e aromáticos (método de análise P.O.N.A.) e SARPAL, KAPUR E SINGH (2000) que trabalharam com RNM ^1H , obtendo parafinas, aromáticos e naftênicos totais na gasolina (análise P.N.A.) e posteriormente completou-se a análise (2001) com a obtenção de olefinas totais (PONA).

Uma das técnicas analíticas mais exploradas na área de combustíveis é a cromatografia gasosa. Um grande número de compostos podem ser separados ao permear a gasolina através de uma coluna contendo uma fase estacionária. A separação se processa de acordo com a volatilidade relativa dos compostos e afinidade

química com a fase estacionária. Um histórico sobre a cromatografia gasosa e suas diferentes técnicas de utilização é escrito por BEENS e BRINKMAN (2000). Apesar de ser utilizada desde sua invenção na indústria petrolífera, esta técnica estabelecida e madura ainda desafia novos desenvolvimentos. Um deles é o GCxGC (GC bidimensional) que pode fornecer uma grande quantidade de picos e cromatogramas estruturados. SCHOENMAKERS et al. (2000) estudam a análise detalhada de hidrocarbonetos com a técnica de cromatografia gasosa bidimensional extensiva (GCxGC) que fornece uma separação mais detalhada que as colunas normais. Nesta técnica duas colunas são conectadas em série. Antes de entrar na segunda coluna, o efluente da primeira coluna é modulado termicamente para melhorar a entrada da amostra em pulsos químicos equidistantes. O método GCxGC produz separações particulares de algumas subclasses tais como ciclopentanos dos ciclohexanos. RAGUNATHAN et al. (1999) fez uma revisão sobre as técnicas cromatográficas (gasosas) existentes, tais como GC-multidimensional, GC-rápido, GC-coluna dual em paralelo e GC-MS sob diversas combinações de detectores.

2.2 REDES NEURONAIS ARTIFICIAIS

2.2.1 Introdução

As redes neuronais artificiais (RNA's) tiveram inspiração a partir dos sistemas biológicos. Um neurônio biológico pode ser representado por suas sinapses, que são junções nas quais um sinal é passado de um neurônio para outro, e pela força sináptica, que é a magnitude da influência do sinal para o próximo neurônio. As ligações sinápticas entre dois neurônios biológicos são representadas pelas conexões entre dois neurônios artificiais nas RNA's, e a força sináptica é representada por um peso associado a cada conexão. Ambos os sistemas, biológicos ou artificiais, usam um grande número de processadores simples com alto grau de conectividade e processam a informação através de eventos relativamente discretos. Utilizam também uma forma distribuída de representação ou memória. São sistemas adaptivos que aprendem pelo ajuste da força e número de conexões entre neurônios (WYTHOFF, 1993). As RNA's

são estruturas matemáticas utilizadas em processamento de dados complexos, as quais podem ajustar ou modelar o comportamento não linear de muitos processos químicos. São normalmente utilizadas quando as equações que descrevem a variação de um sistema são desconhecidas, ou não podem ser resolvidas adequadamente.

Existem muitos tipos de RNA's que foram desenvolvidas até a presente data e a escolha do tipo depende basicamente do problema a ser resolvido. Alguns exemplos de arquiteturas de RNA's são apresentados na figura 2.1. A arquitetura ou topologia de uma RNA compreende o número de neurônios em cada camada, tipo de conexão entre os neurônios e o número de camadas existentes (HAYKIN, 1999).

Pode-se classificar as RNAs de acordo com:

a) o número de camadas:

- rede de camada única: existem somente as ligações sinápticas de entrada e saída da rede (figura 2.1 (I) e (V));
- rede de múltiplas camadas: existe um neurônio ou mais entre alguma entrada e saída da rede (figura 2.1 (II), (III) e (IV)).

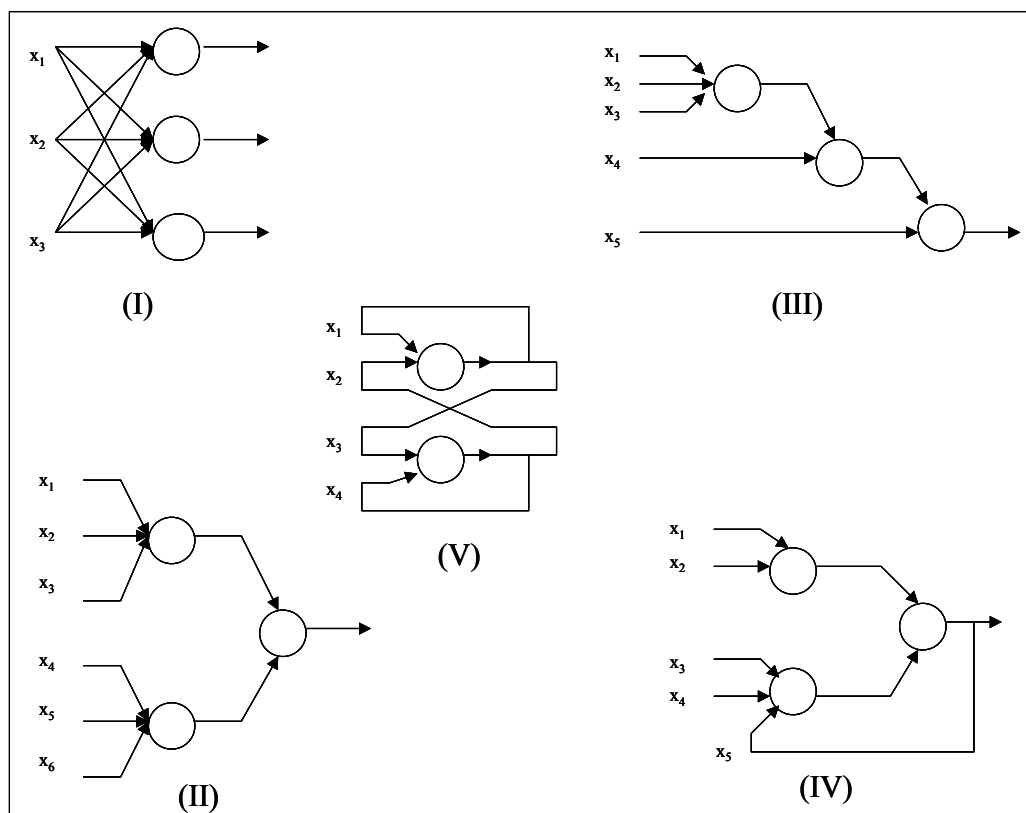


FIGURA 2.1 – TIPOS DE REDES NEURONAIS ARTIFICIAIS

- b) as conexões entre os neurônios:
 - rede feedforward: a saída de um neurônio da i -ésima camada da rede não é usada como entrada de neurônios em camadas de índice menor ou igual a i (figura 2.1 (I), (II) e (III)). O fluxo de informação segue uma única direção;
 - rede feedback ou recorrente: a saída de algum neurônio da i -ésima camada da rede é usada como entrada de neurônios em camadas de índice menor ou igual a i (figura 2.1 (IV) e (V)). As redes do tipo feedback são capazes de representar sistemas mais complexos.
- c) a conectividade:
 - rede fracamente ou parcialmente conectada (figura 2.1 (II), (III) e (IV));
 - rede completamente conectada (figura 2.1 (I) e (V));
- d) forma de treinamento:
 - treinamento supervisionado: alimenta-se a rede com dados de entrada e de saída desejados. O objetivo é ajustar os parâmetros da rede de forma a encontrar uma correlação entre as entradas e saídas. O exemplo mais utilizado de rede com treino supervisionado é o “backpropagation” ou retropropagação. Um caso particular é o aprendizado por reforço, cuja única informação de saída fornecida é se a resposta está ou não correta.
 - treinamento não supervisionado ou auto organizado: o resultado desejado não é fornecido, permitindo que a rede encontre grupos ou classes por associação estatística dos dados de entrada. Um caso particular deste tipo de aprendizado é o por competição, onde existe uma competição entre as unidades de saída para decidir qual delas será ativada e seus pesos atualizados.

2.2.2 Rede Neuronal Artificial por Retropropagação

Uma RNA por retropropagação, comumente denominada perceptron multicamadas (multilayer perceptron) possui três características principais (HAYKIN, 1999):

- o modelo em cada neurônio da rede inclui uma função de transferência, exceto nos neurônios de entrada onde não ocorre nenhum tipo de processamento. Duas condições estão ligadas às funções de transferência: elas devem crescer monotonicamente e os valores utilizados devem estar confinados ao intervalo $[0;1]$. Por isso é necessário que os dados de entrada e saída estejam dentro de um intervalo de normalização, em geral entre $[0,2;0,8]$ ou $[0,3;0,7]$;
- a rede possui uma ou mais camadas de neurônios ocultos, na qual ocorre o processamento de informações;
- a rede exibe alto grau de conectividade determinado pelas sinapses.

O esquema apresentado na figura 2.2 refere-se a uma rede neuronal de retropropagação (backpropagation) completamente conectada, com suas três camadas: de entrada, oculta e de saída.

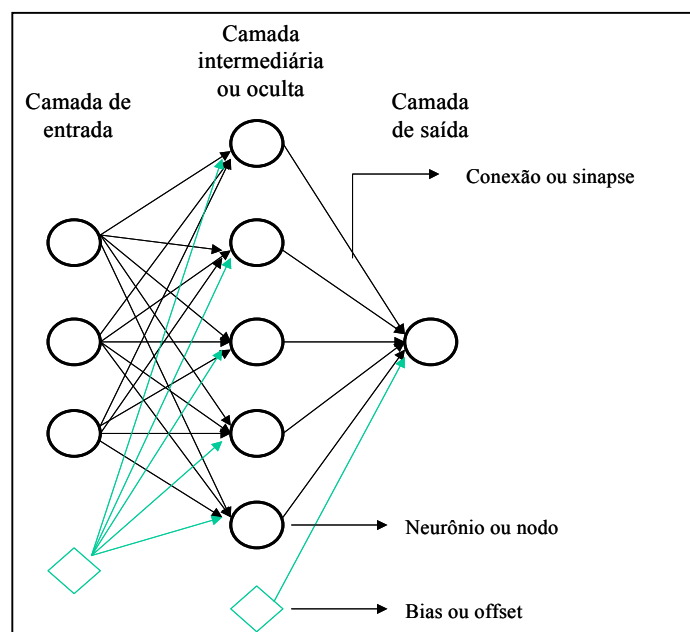


FIGURA 2.2 – ESQUEMA DE UMA REDE NEURONAL ARTIFICIAL.

A rede neuronal por retropropagação apresenta capacidade de associação de informação devido à sua estrutura de distribuição paralela. Assim, uma RNA oferece as seguintes capacidades e propriedades úteis:

- a) não linearidade. Um neurônio artificial pode ser linear ou não. Uma rede neuronal que interconecta os neurônios por si só é não linear. Esta propriedade é extremamente importante, particularmente se o mecanismo físico fundamental responsável pela geração dos dados de entrada for não linear;
- b) capacidade de mapeamento entrada-saída. A existência de correlação entre variáveis de entrada e saída é verificada pela qualidade de suas previsões e da simulação de seu conjunto de dados de treinamento.
- c) adaptabilidade. Uma RNA treinada para operar em um ambiente específico pode ser facilmente retreinada com poucas mudanças nas condições operacionais ambientais;
- d) robustez. A abrangência de inferência é maior que os métodos clássicos de regressão. A RNA pode se adaptar dentro de certos limites para novas condições, mesmo que não tenha sido exemplificado no treinamento.

A arquitetura de uma RNA por retropropagação é representada pelos números de neurônios em cada camada e conexões entre elas. A camada de entrada corresponde ao número de variáveis de entrada de um processo, enquanto que a de saída fornece as variáveis a serem previstas de um processo. A camada oculta possui um número variável de neurônios os quais fornecem a estrutura não linear que conecta os dados de entrada e saída. O banco de dados formado pelas variáveis de entrada e saída é dividido em duas partes e o processamento dos dados é diferenciado em duas fases:

- a) aprendizado ou treinamento: as entradas e saídas são fornecidas com a finalidade de se calcular os parâmetros da rede;

- b) validação ou teste: somente as entradas são fornecidas para a rede. A saída é fornecida para a finalidade de comparação com o valor previsto pela rede e observar sua capacidade preditiva.

O treinamento de uma RNA por retropropagação é do tipo supervisionado e seu objetivo é ajustar os parâmetros da rede de forma a encontrar uma correlação entre as entradas e saídas. Os parâmetros mais importantes da rede são os pesos sinápticos (W), que são ajustados até que a diferença entre a previsão da rede e o valor experimental seja minimizada a um valor suficientemente pequeno. Para variáveis cuja influência é pequena para uma dada propriedade, seu peso será próximo de zero. Com isto temos uma arquitetura com neurônios, pesos, “bias” e funções de ativação montada para os dados fornecidos para o treinamento da rede. A figura 2.3 exemplifica a arquitetura de uma rede por retropropagação. A cada conjunto de entrada submetido à rede, compara-se a resposta obtida com o valor experimental, e os pesos das conexões são ajustados, retropropagando-se o gradiente do erro em um processo iterativo até que o erro seja minimizado. A figura 2.4 ilustra o fluxo de informação e a retropropagação do gradiente do erro.

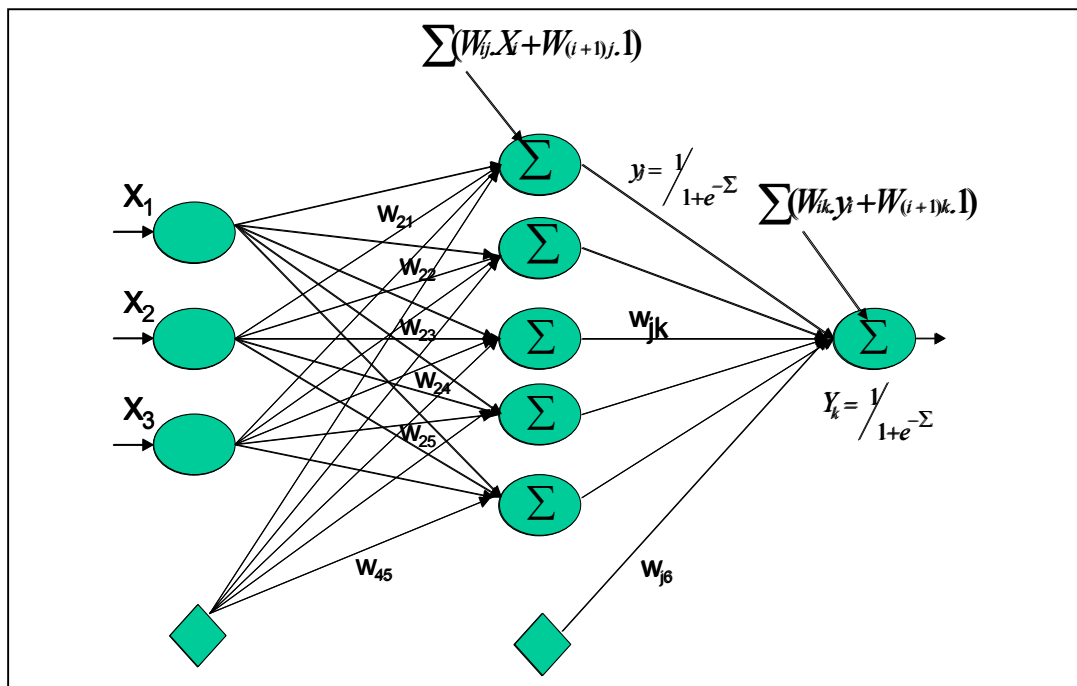


FIGURA 2.3 – ARQUITETURA DE REDE POR RETROPROPAGAÇÃO.

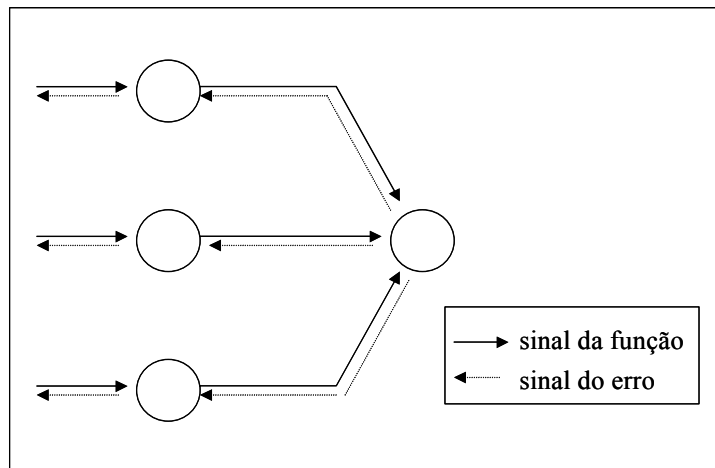


FIGURA 2.4 – ILUSTRAÇÃO DE DOIS SINAIS FLUINDO EM UM PERCEPTRON MULTICAMADAS.

FONTE: HAYKIN, 1999.

NOTA: O sinal da função se propaga, enquanto que o sinal do erro retropropaga-se.

Caso o desvio obtido não seja satisfatório, retorna-se ao treinamento para novo cálculo dos pesos num processo iterativo até que o desvio atinja um valor satisfatório (critério de parada). Outro critério de parada de treinamento é o número de iterações pré-estabelecidas.

Simultaneamente a cada iteração, passa-se a testar a rede com outro conjunto de dados diferentes dos dados de treinamento, denominado conjunto de teste ou validação. A rede com arquitetura montada e treinada passa a prever a saída do conjunto de teste imitando a utilização normal da rede. O dado de saída experimental serve apenas para avaliar a diferença entre o valor experimental e o valor previsto. O desvio monitorado na validação é um modo de observar o desempenho da rede neuronal e é calculado pela soma quadrática dos erros, que é a forma mais comum da função erro:

$$E = \sum_{n=1}^{NP} \sum_{k=1}^P (y_{kn} - O_{kn})^2 \quad (2)$$

onde:

E = erro quadrático de treinamento

NP = número de pontos do conjunto de treinamento

P = número de saídas da rede neuronal

y = valor experimental

O = valor previsto pela rede neuronal

Também é interessante monitorar o desvio pela média do erro quadrático, ou seja, a soma quadrática dos erros divididos pelo número total de observações (E/n).

2.2.3 Parâmetros da Rede por Retropropagação

Para se configurar uma rede neuronal é importante analisar a influência de parâmetros da rede no mapeamento conjunto de dados apresentado na etapa de treinamento. As principais variáveis são:

Função de ativação ou transferência ($f(n)$)

A função que calcula o sinal de saída de um neurônio a partir da entrada é usualmente referida como função de transferência (ZUPAN, 1991). A princípio a forma da função é quase arbitrária, com duas condições vinculadas a ela: seus valores devem estar confinados no intervalo $[0;1]$ e devem crescer monotonicamente. Para aplicação em redes neuronais, a mais comumente utilizada é a sigmoideal:

$$\text{logsig}(n) = 1 / [1 + \exp(-n)] \quad (3)$$

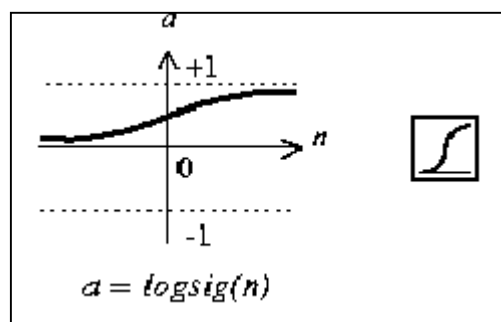


FIGURA 2.5 – FUNÇÃO SIGMOIDAL.

Outras funções de transferência que também podem ser utilizadas:

$$\text{tansig}(n) = 2 / [1 + e^{(-2*n)}] - 1 \quad (4)$$

$$\text{purelin}(n) = n \quad (5)$$

$$\tanh(n) = 2 / [1 + e^{(-n)}] - 1 \quad (6)$$

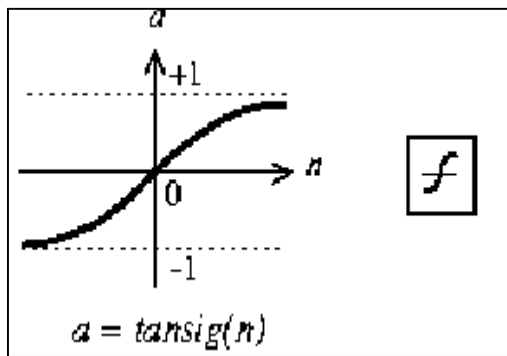


FIGURA 2.6 – FUNÇÃO TANSIG.

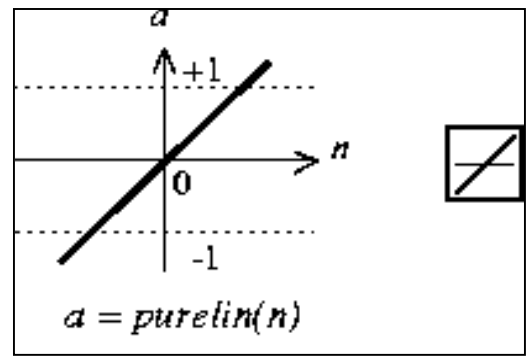


FIGURA 2.7 – FUNÇÃO LINEAR.

Pesos (W)

São partes importantes na retropropagação dos sinais através da rede. Eles estabilizam a ligação entre entrada e saída e retêm a informação primordial da rede neuronal sobre a relação problema-solução (SMITS, 1994). São as forças conectivas entre os neurônios, representando a influência positiva ou negativa da variável de entrada sobre a variável de saída, para valores positivos e negativos respectivamente. Quanto maior o módulo deste valor, maior será a influência, ao passo que se este valor estiver muito próximo de zero, a influência da variável de entrada na variável de saída será insignificante.

“Bias” (θ)

Cada neurônio necessita do parâmetro θ para ajustar todas as entradas de modo que caiam dentro da região que possa ser usada pela função de transferência para melhor performance geral da rede. Pode ser tratado exatamente da mesma maneira que outro peso do neurônio (ZUPAN, 1991). A figura 2.8 ilustra o translado horizontal ao variar o parâmetro θ . O valor deste parâmetro é fixado em 1 (para a função sigmoidal).

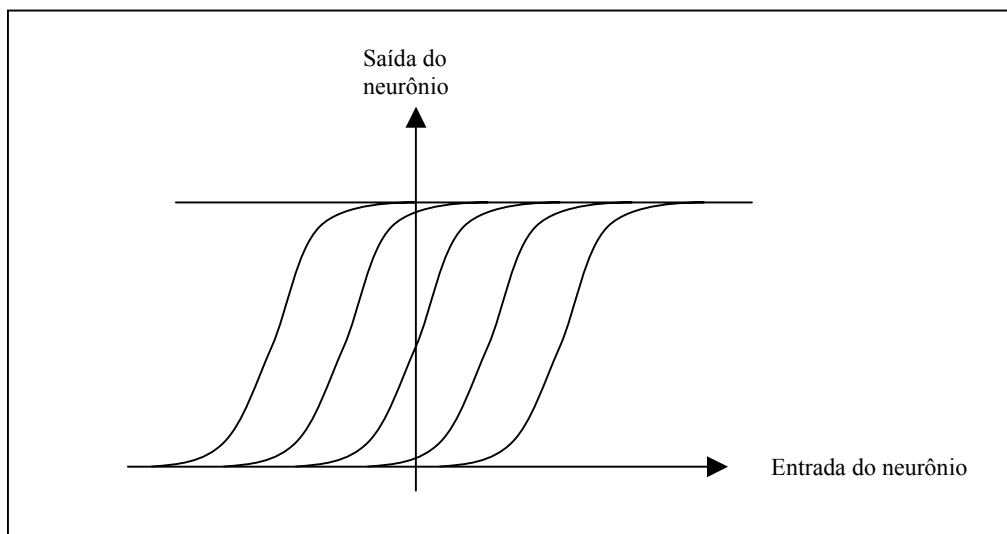


FIGURA 2.8 - EFEITO DA VARIAÇÃO DO PARÂMETRO θ EM UMA FUNÇÃO SIGMOIDAL.

FONTE: ZUPAN, J.; GASTEIGER, J.. Neural Networks: A new Method for Solving Chemical Problems or just a Passing Phase?. **Analytica Chimica Acta**, v. 248, p. 1- 30, 1991.

NOTA: Enquanto valores negativos e positivos são atribuídos, o parâmetro θ move horizontalmente a função sigmoideal, para valores positivos e negativos respectivamente.

Fator de aprendizado (η)

O algoritmo backpropagation proporciona uma aproximação da trajetória na função erro através do método do gradiente descendente (ver figura 2.9). A correção do conjunto de pesos é proporcional ao gradiente do erro em função dos pesos:

$$\Delta W = \eta \frac{\partial E}{\partial W} \quad (7)$$

Assim, o fator de aprendizado é apenas uma constante de proporcionalidade que aumenta ou diminui a intensidade da correção dos pesos dada pelo gradiente do erro. Quanto menor o parâmetro fator de amortecimento ou razão de aprendizado, menores serão as mudanças dos pesos da rede de uma iteração para a próxima, e mais suave será a trajetória na função erro. Esta melhora, no entanto, está amarrada ao custo de um treinamento mais lento. Por outro lado, se o parâmetro η for muito grande para aumentar a velocidade de aprendizado, o resultado de grandes mudanças nos pesos fazem com que a rede torne-se instável, com grandes oscilações nos erros. Em

resumo, utilizando-se um fator de amortecimento pequeno o treinamento torna-se lento, além da probabilidade do processo iterativo ficar preso em um mínimo local. Por outro lado, com o η grande, o treino torna-se mais rápido, porém existe a probabilidade do processo iterativo não detectar o mínimo global (HAYKIN, 1999). A escolha do valor de η é totalmente empírica, havendo recomendações na literatura tanto para $\eta < 0,1$ até para $\eta > 10$. Ao monitorar o desvio quadrático do teste, pode-se observar oscilações nos desvios conforme o avanço do processo iterativo. Isto pode ajudar a escolher os limites inferior e superior deste parâmetro durante o processo de treinamento da rede.

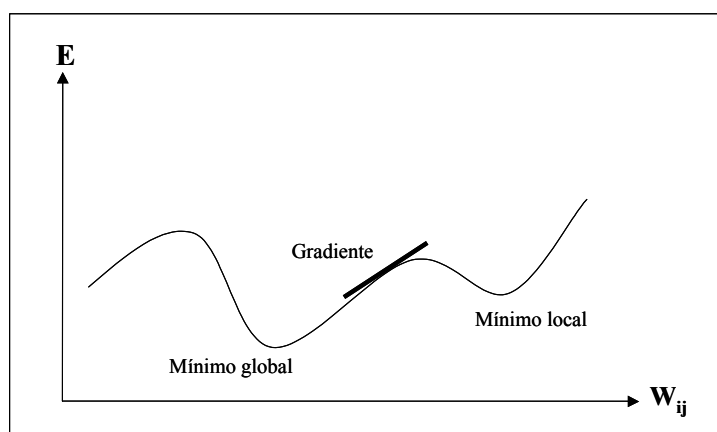


FIGURA 2.9 – SUPERFÍCIE DO ERRO COMO FUNÇÃO DE UM PESO.

FONTE: SMITS, J.R.M. et al. Using Artificial Neural Networks for Solving Chemical Problems. Part I. Multi-layer Feed-forward Networks. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 22, p. 165 -189, 1994.

Existem dois tipos de algoritmos para tratar o valor de η : o fixo, que mantém o seu valor até o final das iterações, e o variável, que aumenta o seu valor numérico quando o desvio quadrático tem tendência de diminuir e diminui quando existe tendência do desvio aumentar (YAMAMOTO, 1998). Ambos os tipos de algoritmo para o fator de aprendizado podem chegar ao mesmo tipo de resultado, dependendo do conjunto de dados iniciais. A maior vantagem do η variável é a rapidez de treinamento alcançada, com um melhor ajuste de dados, principalmente ao observar ruído nos dados de treinamento.

Intervalo de Normalização

Sugere-se que os dados de entrada e saída da rede devem ser normalizados dentro do intervalo $[0,2;0,8]$ para que caiam na região de transição da função de transferência (ver figura 2.10). Se diminuirmos este intervalo, muda-se a faixa de trabalho na região de transição da função, modificando a capacidade extrapolativa da rede. A diminuição do intervalo de normalização possui um limite, pois a rede perde a sua principal característica de mapeamento de sistemas não lineares, comportando-se como uma regressão multilinear (YAMAMOTO, 1998).

A fórmula para normalização de dados é a seguinte:

$$VN = (VA - V \text{ mín.} / V \text{ máx.} - V \text{ mín.}) \times (LS - LI) + LI \quad (8)$$

onde:

VN = valor normalizado

VA = valor atual

Vmín = mínimo valor dos dados de entrada

Vmáx = máximo valor dos dados de entrada

LS = limite superior do intervalo de normalização

LI = limite inferior do intervalo de normalização

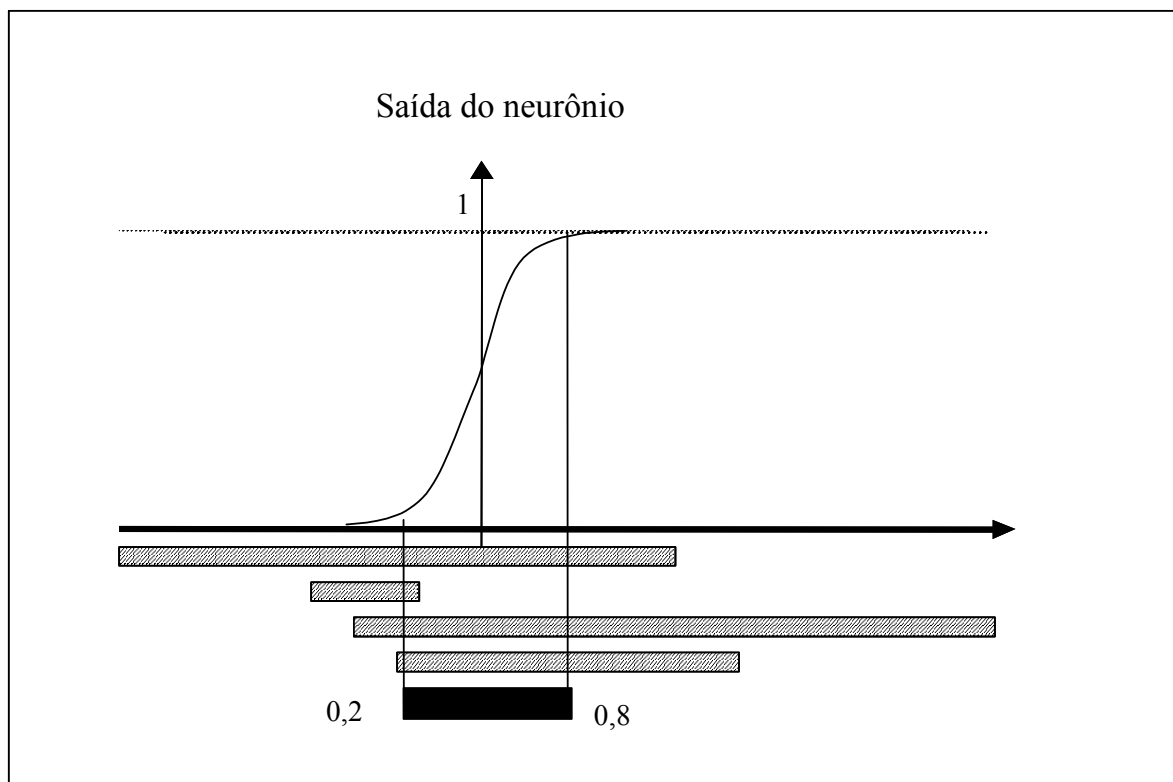


FIGURA 2.10 – REGIÃO DOS DADOS DE ENTRADA PARA UMA FUNÇÃO DE TRANSFERÊNCIA.

FONTE: ZUPAN, J.; GASTEIGER, J.. Neural Networks: A new Method for Solving Chemical Problems or just a Passing Phase?. *Analytica Chimica Acta*, v. 248, p. 1- 30, 1991.

NOTA: As regiões onde todas as entradas e saídas de rede dos neurônios devem estar para que as respostas produzam seus valores na região de transição da função (indicado pela caixa mais escura embaixo) ao invés da região constante (hachurada).

Número de Neurônios na Camada Oculta

O número de neurônios na camada oculta está intimamente ligado ao número de parâmetros ajustáveis da rede. Uma rede neuronal com poucos neurônios na sua camada oculta possui poucos parâmetros ajustáveis, que podem não ser suficientes para representar o sistema em estudo. Por outro lado, com o aumento indiscriminado do número de neurônios, os parâmetros existentes acabam representando muito bem a relação entre as variáveis de entrada e saída. Tão bem que representa apenas o sistema em estudo, perdendo sua capacidade extrapolativa ou generalização.

Número de Pontos no Conjunto de Treinamento

A quantidade de dados utilizados para treinamento é um fator limitante. Segundo ZHOU e GAUTHIER (1999), se um conjunto de dados for muito pequeno ou muito específico para uma certa porção dos dados totais, os resultados previstos pelo modelo de rede treinada podem ser menos precisos fora desta região. Entretanto, se a rede é treinada com muitos dados, o tempo de treinamento será longo e a rede pode memorizar os dados do treino sendo ineficiente para fornecer uma resposta mais precisa em dados novos que não foram aprendidos antes (“overffiting”). Portanto, a capacidade de extrapolação da rede também está ligada ao conjunto de dados estabelecidos para treinamento e teste, sendo que os mesmos deverão ser criteriosamente selecionados para que sejam representativos de uma população ou um problema.

2.2.4 O Algoritmo “Backpropagation”

O algoritmo “backpropagation” usa uma estimativa instantânea para o gradiente da superfície do erro (HAYKIN, 1999). O algoritmo é, entretanto, estocástico por natureza, o que significa que possui uma tendência a “oscilar” no caminho da direção verdadeira, para um mínimo na superfície da função erro. De fato, o aprendizado por retropropagação é uma aplicação de um método estatístico conhecido como aproximação estocástica. Conseqüentemente tende a convergir vagarosamente. Pode-se identificar duas causas fundamentais para esta propriedade:

- a) Considerando a superfície da função erro plana, o ajuste aplicado ao peso é pequeno e, conseqüentemente muitas iterações do algoritmo podem ser requeridas para produzir uma redução significativa na performance do erro da rede. Alternativamente, considerando a superfície da função erro altamente curvilínea, o ajuste aplicado ao peso é grande, aumentando a velocidade de treinamento, porém um mínimo da superfície pode não ser encontrado pelo algoritmo. O parâmetro que controla este tipo de ajuste é o fator de aprendizado e deve ser avaliado para cada conjunto de dados. Em geral, a superfície do erro é extremamente complexa e para muitas

aplicações práticas, um mínimo local já pode ser suficiente para encontrar resultados satisfatórios.

- b) uma estimativa inicial dos pesos pode apontar longe o mínimo da superfície do erro: mesmo os ajustes aplicados aos pesos podem induzir o algoritmo a se mover na direção errada, divergindo da solução ou indo de encontro a um mínimo local desfavorável.

A informação de um neurônio dentro de uma camada (**i**) é multiplicada por um peso (**W_{ij}**) e mandado para a próxima camada (**j**). Todas as variáveis de entrada (**X_i**) são somadas e multiplicadas por (**W_{ij}**) de acordo com a equação (9). Pesos randômicos são gerados para a primeira sequência de cálculo.

$$S_j = \sum_{i=1}^N W_{ij} X_i + W_{N+1j} \quad (9)$$

com $j = 1, 2, \dots, M$

onde:

N = número de variáveis de entrada;

M = número de neurônios da camada oculta.

A saída do neurônio (**O_j**) é processado por uma função de transferência, como a função sigmoideal, tangente hiperbólica ou linear:

$$O_j = \frac{1}{1 + e^{-S_j}} \quad (10)$$

$$O_j = \frac{2}{1 + e^{-2S_j}} \quad (11)$$

$$O_j = \alpha \cdot S_j \quad (12)$$

onde α é uma constante de proporcionalidade.

O processo de treinamento consiste em calcular os pesos que minimizam o erro (o quadrado da diferença entre os valores experimentais e os calculados pela rede), representado pela equação:

$$E = \sum_{n=1}^{NP} \sum_{k=1}^P (y_{kn} - O_{kn})^2 / n \quad (13)$$

onde:

E = erro quadrático de treinamento

NP = número de pontos do conjunto de treinamento

P = número de saídas da rede neuronal

y = valor experimental

O = valor previsto pela rede neuronal

n = número de observações (treinamento ou teste).

Os pesos são calculados através do algoritmo backpropagation:

$$W_{ij}^{m+1} = W_{ij}^m + \Delta W_{ij}^m \quad (14)$$

onde m = número da iteração.

O ajuste dos pesos é feito de acordo com a equação:

$$\Delta W_{ij}^m = -\eta \frac{\partial E}{\partial W_{ij}^m} \quad (15)$$

onde η = fator de aprendizado.

Após o ajuste dos pesos, o cálculo se reinicia por um processo iterativo até que o critério de parada seja alcançado. Dois critérios de parada são normalmente utilizados: o treinamento é interrompido após um número fixo de iterações ou considera-se que o algoritmo convergiu quando o erro quadrático médio atingiu um valor suficientemente pequeno. Avaliando-se a soma do erro quadrático dos pontos de teste, escolhe-se a melhor arquitetura.

2.2.5 Outros Tipos de Algoritmos e Redes Neurais

Como foi mencionado anteriormente, existem diversos tipos de redes neurais e cada uma com aplicação direcionada. Uma das mais complexas é a rede Hopfield, do tipo recorrente, que funciona como uma memória auto-associativa para armazenagem e recuperação de objetos, podendo ser usada para redução de ruídos. Com o passar dos anos, a rede Hopfield (discreta), foi modificada e melhorada, resultando na rede Hopfield contínua. Esta nova rede também opera como uma memória auto-associativa, mas também pode ser utilizada com rede de otimização computacional (MELSSSEN et al., 1994). Ambos os tipos se comportam como sistemas dinâmicos. A figura 2.11 ilustra a rede Hopfield.

Outro tipo de rede neuronal bastante utilizada em problemas químicos é a rede Kohonen. O treinamento desta rede é realizado da forma não supervisionada e quando o mesmo está terminado, os vetores dos pesos tendem a se aproximar de uma distribuição dos exemplos fornecidos. A técnica de mapeamento da rede Kohonen é usada principalmente para um exame em dados para os quais não se tem a priori, nenhum conhecimento a respeito da estrutura interna possível, ou seja, é utilizada para propósitos de classificação (MELSSSEN et al., 1994). Uma rede baseada na teoria de ressonância adaptiva (ART- adaptive resonance theory) também é um tipo de rede com treino não supervisionado (por competição) e sua arquitetura em geral possui duas camadas ocultas. A conexão entre elas é especial, no modo “forward” por uma matriz de pesos (W_1) e no modo “feedback” por outra matriz de pesos (W_2). Geralmente é utilizada para classificação de dados (WIENKE; KATEMAN, 1994).

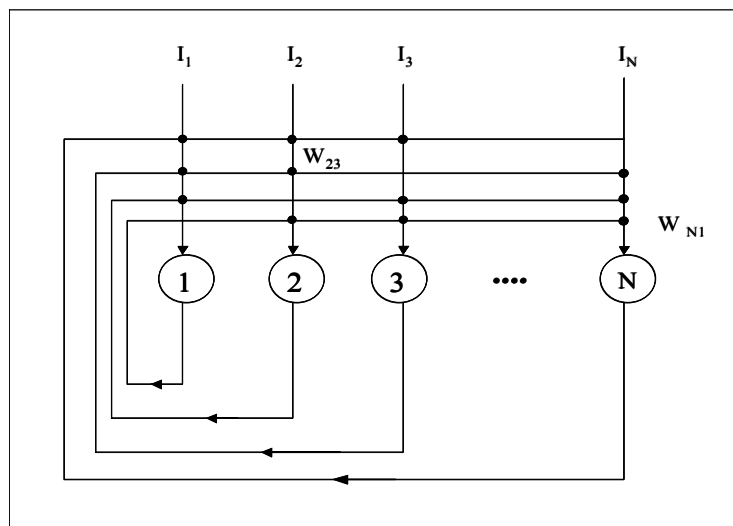


FIGURA 2.11 – ARQUITETURA DE REDE NEURONAL HOPFIELD.

FONTE: MELSEN, W. J. et al.. Using Artificial Neural Networks for Solving Chemical Problems – Part II. Kohonen Self-organizing Feature Maps. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 23, p. 267-291, 1994.

Existem tipos ainda mais complexos em termos de arquitetura, como exemplo, as redes hierárquicas ou modulares, que consistem em um número de sub-redes acopladas e arranjadas em camadas. Cada sub-rede é direcionada para captar aspectos específicos nos dados de entrada. Uma sub-rede modela um subconjunto das variáveis de entrada, porém as relações entre as variáveis são determinadas pelo treinamento da rede como um todo (MAVROVOUNIOTIS; CHANG, 1992).

Outra rede utilizada para previsão de propriedades é a de rede neuronal de base radial, que emprega uma função Gaussiana como função de transferência. Uma transformação não linear nas variáveis de entrada é realizada calculando-se a distância euclidiana entre o vetor da entrada e um ponto central (KORRES et al., 2002).

Existem também os algoritmos de treinamento diferenciados. Um algoritmo que melhora as oscilações do backpropagation é o BP com momentum:

$$\Delta W_{ij}^m = -\eta \frac{\partial E}{\partial W_{ij}^m} + \alpha [\Delta W_{ij}^{m-1}] \quad (16)$$

onde α é a constante momentum (WYTHOFF, 1993).

Um outro algoritmo muito mencionado nos artigos é o algoritmo genético (GA). O algoritmo genético (GA) simula a força aparente de processos de evolução e sua essência está relacionada a uma dinâmica envolvendo populações de “indivíduos” competindo pelo melhor desempenho, através de seleção, cruzamento e mutação. O melhor indivíduo da geração final é a solução ou, pelo menos, um dado que se aproxima muito dessa solução (MEUSINGER, 1999a).

2.3 QUÍMICA ANALÍTICA ASSOCIADA AO USO DE REDE NEURONAL POR RETROPROPOGAÇÃO

Alguns autores utilizaram redes neuronais para previsão de propriedades de combustíveis. Os primeiros foi van LEEUWEN, JONKER e GILL (1994) que compararam este tipo de regressão com outros clássicos. A rede por retropropagação com momentum, foi utilizada para prever o RON (Research Octane Number) de 824 amostras de gasolina. Uma análise de cromatografia gasosa forneceu a composição química das amostras (análise PIANO). O autor montou quatro bancos de dados de 100 amostras cada para dados de teste. Variou o número de neurônios de 2 a 5, e o critério de parada foi de 10.000 iterações. Com a melhor rede a média quadrática dos desvios para os conjuntos de teste variou de 0,31 até 0,44, sendo que a média dos quatro conjuntos é de 0,35. Como não existe um gráfico dos pontos previstos x calculados, não se sabe se a previsão foi realmente boa. Pode-se comparar apenas com os outros métodos de regressão utilizados que foram uma regressão linear múltipla com PCR, cuja média de desvios foi de 0,36, e uma outra regressão denominada PPReg (“projection pursuit regression”), a qual obteve-se uma média de desvios de 0,34. Como foi um dos primeiros trabalhos nesta linha de pesquisa, o autor deixou de mostrar gráficos de resultados para escrever mais a teoria dos métodos de regressão envolvidos.

SMITS et al. (1994) também utilizaram uma rede por retropropagação com momentum para prever o ponto de ebulição e o índice de retenção de HPLC (cromatografia líquida) de alcanos e alcenos a partir de uma representação da estrutura molecular. Para a previsão de pontos de ebulição, o número de dados de treino foi de

54 para 3 dados de teste. O critério de parada foi de 1000 iterações. Um gráfico dos pontos previstos x calculados foi apresentado, porém os desvios são apenas visualizados e não calculados. Para a previsão do índice de retenção, foi elaborado cinco tipos de banco de dados de entrada, para testar vários tipos de representação molecular. Para um primeiro banco de dados, houve uma variação nos números de neurônios da camada oculta de 3 a 30. Para os outros bancos de dados de entrada, as arquiteturas foram fixadas. Mas para nenhum dos casos a rede conseguiu correlacionar muito bem a representação molecular e o índice de retenção. O autor explica que a representação molecular é do tipo 2D e chega a conclusão que este tipo não consegue fornecer informações para uma boa performance da rede e sugere um estudo em 3D, muito mais complicado, para aprofundamento da representação molecular.

MEUSINGER e MOROS (1999b) estudaram a influência da estrutura molecular de compostos orgânicos no seu comportamento antidetonante. Os 240 compostos químicos cujos BRON (blending RON, efeito individual de cada composto na resistência à detonação) estavam publicados, foram subdivididos em 5 classes principais: oxigenados, aromáticos, olefinas, naftênicos e parafinicos. Cada uma das classes foi subdividida em 16 subclasses. Um número de octana parcial foi calculado para cada grupo estrutural. A somatória dos números de octanos parciais fornece o número de octanas do composto. Uma regressão linear múltipla e uma rede por retropropagação com algoritmo genético foram utilizadas para fazer a conexão entre os grupos estruturais e o BRON. Os resultados obtidos para a rede neuronal foram melhores que os obtidos por regressão múltipla. Os resultados estão expressos na forma de coeficiente de correlação (R), mostrados na tabela 2.1.

TABELA 2.1 – COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO DA PREVISÃO DE BRON PARA DADOS DE TESTE.

TIPO DE REGRESSÃO	GRUPO PRINCIPAL				
	Parafinicos	Naftênicos	Olefínicos	Aromáticos	Oxigenados
Rede neuronal com GA	0,988	0,975	0,984	0,945	0,964
Linear múltipla	0,954	0,877	0,959	0,877	0,919

FONTE: MEUSINGER, R. Qualitative and Quantitative Determination of Oxygenates in Gasoline using ^1H Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. *Analytica Chimica Acta*, v. 391, p. 277-288, 1999b.

Em um novo trabalho, MEUSINGER e MOROS (2001) insistiram em prever o BRON de compostos químicos, porém utilizou a composição química obtida por RMN ^{13}C de cada composto, subdivididos em 28 regiões do espectro. Todos os dados de entrada e saída foram obtidos da literatura, que somam 323 compostos, formando a base para a rede. Do total, 85% dos dados foram usados para treino, 5% para teste e 10% dos dados foram reservados para outro teste independente. Aplicou-se a rede por retropropagação com algoritmo genético para correlação dos espectros de RMN com o BRON. O coeficiente de correlação obtido para o conjunto total de validação (15% dos dados) foi de 0,933. O gráfico de pontos experimentais x calculados mostra uma boa correlação, porém muitos pontos estão com desvios muito grandes com cerca de 40% a 60%.

Outro trabalho comparativo entre várias técnicas de regressão foi realizado por ANDRADE, SÁNCHEZ e SARABIA (1999). A partir de espectros de infravermelho de amostras de gasolina, os autores aplicaram diversas técnicas para prever o MON das mesmas. Observou-se que havia um problema de identificação entre dois tipos de nafta, que classificou como sendo nafta do tipo A, com baixo teor de aromáticos e B, que possui alto teor. Os autores utilizaram as seguintes técnicas de regressão de dados:

- 1 – PLS
- 2 – PLS polinomial
- 3 – LWR (regressão ponderada local) – 2 tipos
- 4 – Rede neuronal com algoritmo genético.

A rede neuronal foi treinada para prever os tipos de nafta, porém confundiu 2 amostras no treinamento e 3 na validação de um conjunto total de 200 amostras. Verificou-se porque a rede não conseguiu correlacionar estas amostras e encontrou-se características de difícil identificação nos espectros, que não são típicas em nenhum dos tipos, ou seja, as amostras não se enquadravam no tipo A ou B. Apesar disto a rede foi utilizada para classificação das naftas. Em seguida aplicou-se as técnicas de regressão para cada tipo de nafta e verificou-se que a rede neuronal apresentou os

menores desvios. Este trabalho não apresenta gráfico experimental x calculado dificultando a interpretação dos resultados.

Um estudo mais prático foi realizado por YANG et al. (2002), que utilizaram 3 tipos de redes neurais e uma regressão múltipla para previsão do número de cetanas e a densidade do diesel. As 69 amostras de diesel foram primeiramente separadas em frações de saturados e aromáticos por cromatografia líquida, e em seguida foram determinadas as composições destas frações por CG – MS. O tempo requerido para cada análise foi de três horas para a cromatografia líquida e de uma hora para CG-MS. A composição química do diesel foi classificada em 12 grupos em porcentagem mássica e forma o banco de dados de entrada para as redes. Os tipos de regressão utilizados foram:

1 – rede por retropropagação (padrão). Critério de parada: 20.000 iterações.

2 – rede por retropropagação por divisão. Os neurônios pertencentes à camada oculta são divididos em três grupos, e para cada grupo é utilizado uma função de transferência diferente. São aplicadas respectivamente uma função gaussiana, tangente hiperbólica e outra função complementar à gaussiana. Critério de parada: 20.000 iterações.

3 – rede por retropropagação com algoritmo genético. Critério de parada: 20 ajustes sem melhora de 1% na previsão do modelo.

4 – utilizou uma regressão linear múltipla com algoritmo PLS (MLR).

O número de amostras selecionadas para treino foram 48, onde 16 delas contém os mínimos e máximos dos dados de entrada e saída. As outras 32 foram selecionadas aleatoriamente. Para teste o número de amostras selecionadas foi de 21.

Os melhores resultados obtidos para previsão do número de cetanas e da densidade, mostrados nos tabelas 2.2 e 2.3, foram os gerados pela rede com algoritmo genético.

TABELA 2.2 – PREVISÃO PARA NÚMERO DE CETANAS DO DIESEL.

RESULTADOS	REDE 1	REDE 2	REDE 3	MLR
R ²	0,97	0,96	0,98	0,96
Porcentagem de dados abaixo de 5%	100	100	100	100

FONTE: YANG, H. et al.. Neural Network Prediction of Cetane Number and Density of Diesel Fuel from its Chemical Composition Determined by LC and GC-MS. **Fuel**, v. 81, p. 65-74, 2002.

TABELA 2.3 – PREVISÃO PARA DENSIDADE DO DIESEL.

RESULTADOS	REDE 1	REDE 2	REDE 3	MLR
R ²	0,74	0,79	0,93	0,76
Porcentagem de dados abaixo de 5%	52,4	71,4	90,5	52,4

FONTE: YANG, H. et al.. Neural Network Prediction of Cetane Number and Density of Diesel Fuel from its Chemical Composition Determined by LC and GC-MS. **Fuel**, v. 81, p. 65-74, 2002.

Aplicações de redes neurais na química analítica também estão sendo empregadas. Na tabela 2.4 estão apresentadas algumas aplicações práticas nesta área, além de outras para previsão de propriedades.

TABELA 2.4 - OUTROS TRABALHOS UTILIZANDO REDES NEURONAIIS ARTIFICIAIS.

AUTOR	TIPO DE REDE	APLICAÇÃO
EGHBALDAR, 1998	"feedforward" com "backpropagation"	Identificação de características estruturais de compostos a partir de espectro de massa atômica.
ELSHARKWY, 2001	"feedforward" com "backpropagation"	Previsão da viscosidade do óleo cru a partir da temperatura, pressão e °API.
JALALI-HERAVI, 2000	"feedforward" com "backpropagation"	Previsão do fator de resposta para o detector de condutividade térmica de diversos compostos orgânicos.
JALALI-HERAVI, 2002	"feedforward" com "backpropagation" treino não supervisionado	Previsão de tempo de retenção relativo de vários compostos orgânicos.
MITTERMAYR, 1994	"feedforward" com "backpropagation"	Identificação de compostos a partir de banco de espectros no UV de compostos conhecidos.
SMITS, 1993	rede modular	Interpretação de espectros no IV para identificação de grupos químicos.
WIENKE, 1994	ART	Classificação de substâncias a partir de espectros no UV e IV.

2.4 CONSIDERAÇÕES PARA UTILIZAÇÃO DE REDE NEURONAL POR RETROPROPOGAÇÃO

As combinações das características da rede por retropropagação mais a habilidade de aprender através de uma experiência de treinamento gera uma grande capacidade de mapeamento de dados (HAYKIN, 1999). Entretanto, estas mesmas características também são responsáveis por algumas deficiências. A presença de uma forma distribuída de não linearidade e a alta conectividade da rede faz com que a análise teórica de um perceptron multicamadas seja de difícil entendimento e o uso de neurônios ocultos fazem com que o processo de aprendizado seja difícil de visualizar. Portanto, existe a necessidade de simplificação da rede para um número pequeno de camadas e neurônios ocultos.

Um problema comum que deve ser observado ao se trabalhar com redes por retropropagação é o “overfitting”, que é uma memorização dos dados de treinamento. Este problema ocasiona uma perda da capacidade preditiva da rede, pois se observa pequenos desvios de previsão para os dados usados na fase de treino, mas grandes desvios quando novos dados de entrada são utilizados (KORRES et al., 2002). O que pode ocasionar o “overfitting” é a redundância dos dados e excesso de neurônios na camada oculta (GARCÍA-MENCIA et al., 2000). Para evitar o overfitting os erros observados no treinamento e no teste são monitorados. Assim que o erro de treinamento cair muito ao mesmo tempo em que o erro de validação subir, ficará caracterizado o overfitting, e a última iteração antes do ocorrido é que deverá ser considerada, finalizando-se o treinamento. O oposto do overfitting é o “underfitting” ou sub-ajuste, o qual é resultante de uma rede com poucos neurônios ocultos, que não consegue representar o sistema que se deseja modelar (KORRES et al., 2002). Para observar tanto o “overfitting” como o “underfitting” aconselha-se além da fase de treino e teste, aplicar-se outro teste com novos exemplos de entrada para a rede e verificar o seu poder preditivo.

A presença de um “outlier” no conjunto de validação ou treino pode afetar as conclusões a respeito da performance da rede. É muito difícil detectar um outlier, a

não ser que seja observado alguma anormalidade durante a execução do ensaio. A decisão final pode ser feita comparando-se os resultados da previsão para um modelo de rede com e sem o ponto no conjunto de treinamento.

Uma análise de sensibilidade também deve ser aplicada ao modelo, visto que as variáveis de entrada podem apresentar diferentes graus de importância e conseqüentemente poderá simplificar o mesmo. Na opinião de KATEMAN e SMITS (1993, p.183) o número de exemplos deve ser cuidadosamente escolhido, no sentido de que possa fornecer uma representação balanceada do problema, com um número mínimo de variáveis de entrada possíveis. Para que o número de variáveis de entrada seja reduzido, é realizada uma análise da arquitetura do modelo final. Os pesos muito próximos de zero indicam que a influência da variável de entrada é pequena para a variável de saída. A redução das variáveis de entrada propicia uma simplificação na arquitetura, reduzindo significativamente o número de parâmetros a serem encontrados, além do tempo destinado para treinamento.

Além da minimização do número de variáveis de saída e a simplificação da arquitetura da rede, é importante que diversos tipos de arquitetura sejam testados ao variar pelo menos, o número de neurônios na camada oculta. Esta otimização é necessária para que se consiga afirmar se houve ou não o melhor ajuste de dados no intervalo estudado. Diversos autores utilizam-se de arquiteturas fixas, tais como YAFFE e COHEN (2001) com rede por retropropagação de 7-29-1 (7 neurônios na camada de entrada, 29 na oculta e um na saída) para previsão de pressão de vapor de compostos químicos a partir do peso molecular, índices de conectividade molecular e temperatura. Outros exemplos de trabalhos com arquitetura fixa são os desenvolvidos por ZHOU e GAUHIER (1999) que utilizam uma rede por retropropagação com 4-25-10-1 para previsão da temperatura de chama adiabática de combustíveis e CHOW et al. (2002) com uma rede de 5-5-9-4 para otimização de um sistema de absorção Chiller. KORRES et al. (2002) utilizaram uma rede 15-15-1 para prever características lubrificantes do diesel obtendo-se um coeficiente de correlação de 0,94. Embora apresente 90% dos dados abaixo do desvio de 5%, não se pode afirmar que este é o melhor resultado, se não foi realizada investigação acerca de outras arquiteturas. O

mesmo ocorre com BASU et al. (1998) que comparam apenas duas arquiteturas ((6-3-1) e (5-3-1)) de redes por retropropagação para previsão de biodegradabilidade de óleos minerais, sendo que os resultados obtidos indicaram desvios de até 19% na previsão da propriedade.

Alguns autores utilizam arquiteturas mais complexas para previsão de várias propriedades ao mesmo tempo, que é o caso de ARRIAGADA, OLAUSSON e SELIMOVIC (2002) que utilizaram uma rede por retropropagação com 4 entradas (tipo de combustível, temperatura do gás de injeção, diferença de potencial e fluxo de combustível de uma célula de combustível de óxido sólido) para otimização de 6 saídas (fluxo de ar, densidade de corrente, voltagem reversível, temperatura de saída do ar, temperatura de saída do combustível e temperatura média do sólido). O propósito é a avaliação da performance de uma célula de combustível. Enquanto o ajuste foi excelente para a grande maioria das saídas (desvios menores que 1%), uma delas (fluxo de ar) foi considerada de difícil ajuste (3-4%). É difícil ajustar simultaneamente todas as variáveis de saída, pois os pesos obtidos tendem a ajustar melhor uma variável em detrimento de outra. Melhor seria se utilizasse uma arquitetura de rede para cada variável de saída, pois se reduz o número de parâmetros a serem ajustados para cada variável de saída da rede (YAMAMOTO, 1998).

A escolha da quantidade de dados de treinamento é importante, já que em excesso de dados redundantes ocorre o “overfitting”. Existem alguns autores que trabalharam com grandes quantidades de dados, devido à facilidade de obtenção na literatura. Um exemplo é o trabalho de YAFFE e COHEN (2001), onde utilizou-se, de 5.330 dados de treino, 1.529 para teste e um terceiro conjunto de validação com 754 amostras de diversos compostos químicos para previsão de pressão de vapor a diversas temperaturas. Apesar de apresentar gráficos com desvios de 9,2% para teste e 10,7% para validação, o excesso de dados é visível e a capacidade preditiva da rede está resumida a uma média estatística, ou seja, os pontos fora da média estatística apresentam desvios de até 67%. ZHOU e GAUTHIER (ZHOU, 1999) treinaram redes utilizando 8.000 a 40.000 pontos no conjunto de treinamento, enquanto que utilizaram apenas 4 pontos para teste. Tentou-se prever a temperatura da chama adiabática. A

previsão ficou muito boa na validação (desvio máximo de 3,8%), mas a rede não conseguiu correlacionar pontos extremos (valores muito baixos ou muito altos) durante o treinamento, que fugiam da média. Por outro lado, a repetição de dados que pode ser prejudicial para a rede por retropropagação, não o é para outros tipos de rede neuronal. SONG et al. (2001) utilizam uma rede neuronal com treinamento não supervisionado denominado ART-2a (Adaptive Resonance Theory), que é um tipo de rede por competição, para classificar em diferentes grupos homogêneos as partículas provenientes da combustão da gasolina e diesel obtidas por espectro de massa de partículas. Este tipo de rede possui a habilidade de detectar “outliers” e formar novas classes, mas necessita de um grande número de amostras para que consiga associar características e agrupá-las. Os autores utilizaram 500 amostras para treinamento. À medida que o número de amostras aumentou, o erro quadrático diminuiu, com melhor classificação.

Para que uma seleção de amostras seja criteriosa, a realização de estudos estatísticos e aplicação de metrologia é de fundamental importância, visto que o controle de qualidade dos pontos experimentais torna-se necessário ao uso de redes neurais, pois para qualquer tipo de ajuste, mesmo uma simples regressão linear, os pontos experimentais não devem inserir muito ruído, caso contrário o ajuste pode não ocorrer.

Levando-se em consideração todos os pontos explicados, tomou-se as devidas precauções para se evitar o overfitting, com a quantidade de dados para treino e teste criteriosamente escolhidos através de estudos estatísticos e simplificação da arquitetura de rede. A redução das variáveis de entrada e a variação nas arquiteturas, além da verificação de existência de “outlier” foram aplicadas neste trabalho. A qualidade dos dados obtidos também foi verificada por testes de repetitividade e reprodutividade nos equipamentos envolvidos.

3 TEORIA ESTATÍSTICA E METROLOGIA

Metrologia é a ciência que estuda as medições, visando o conhecimento de erros sistemáticos ou aleatórios de uma medida e compreende: medição, ensaio, calibração, inspeção e verificação de um instrumento de medição. De uma forma geral, todos os instrumentos de medição apresentam erros de indicação e incerteza de medição, ocasionando falsas interpretações dos dados obtidos. Portanto, para um bom controle de processo, produto ou serviço, é necessário que a metrologia esteja sempre presente.

Conforme o vocabulário internacional de metrologia, a repetitividade de um instrumento de medição é definida como:

“Grau de concordância entre os resultados de medições sucessivas de um mesmo mensurando efetuadas sob as mesmas condições de medição” (INMETRO, 1995).

Essas condições são denominadas condições de repetitividade, que incluem:

- a) redução ao mínimo das variações devido ao observador;
- b) mesmo procedimento de observação;
- c) mesmo observador;
- d) mesmo instrumento de medição, utilizado nas mesmas condições;
- e) mesmo local;
- f) repetições em curto período de tempo.

A repetitividade pode ser expressa quantitativamente em termos de características de dispersão das indicações. Portanto, a repetitividade é a capacidade de um equipamento de medição repetir diversas vezes o mesmo resultado em condições idênticas de operação, ou seja, se os resultados de medição se repetem consideravelmente podemos concluir que o instrumento possui uma alta repetitividade e a mesma não está afetando de forma significativa na medição.

Conforme o vocabulário internacional de metrologia, a reprodutibilidade de medições é definida como:

“Grau de concordância entre os resultados das medições de um mesmo mensurando, efetuadas sob condições variadas de medição” (INMETRO, 1995).

As condições alteradas podem incluir:

- a) princípio de medição;
- b) método de medição;
- c) observador;
- d) instrumento de medição;
- e) padrão de referência;
- f) local;
- g) condições de utilização;
- h) tempo.

Observações:

- 1) Para que uma expressão de reprodutibilidade seja obtida, é necessário especificar as condições que foram alteradas.
- 2) A reprodutibilidade pode ser expressa quantitativamente em termos da dispersão dos resultados.

Para avaliar a dispersão das leituras utilizou-se a análise por desvio padrão experimental (portaria INMETRO nº 029 de 10 de março de 1995).

Análise por desvio padrão experimental: para uma série de “n” medições de uma mesma grandeza, o parâmetro “s” (desvio padrão), que caracteriza a dispersão dos resultados é dado pela equação:

$$s = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 / n - 1} \quad (17)$$

onde:

x_i é o resultado da medição de ordem $i = 1, 2, 3, \dots, n$.

\bar{x} é a média aritmética dos “n” resultados considerados.

A expressão s / \sqrt{n} fornece uma estimativa do desvio padrão da média aritmética \bar{x} em relação à média “m” da população global sendo denominada “desvio padrão experimental da média”. A partir deste valor calcula-se o intervalo de confiança ao nível de 95% (MENDENHALL, 1985) e a variação em termos percentuais deste intervalo de confiança.

Para um número igual ou maior que 30 leituras, utilizou-se distribuição normal para o cálculo do intervalo de confiança:

$$\text{intervalo} = \pm z_{\alpha/2} \cdot s / \sqrt{n} \quad (18)$$

onde $z_{\alpha/2}$ = variável normal padronizada da média. Para um nível de significância de 95%, o valor correspondente de $z_{\alpha/2}$ é de 1,96, aplicado para leituras iguais a 30 observações.

Para amostragens menores que 30, utilizou-se distribuição t-student para o cálculo do intervalo de confiança:

$$\text{intervalo} = \pm t_{\alpha/2} \cdot s / \sqrt{n} \quad (19)$$

onde:

$t_{\alpha/2}$ = parâmetro estatístico tirado de tabelas para distribuição t-student (TOLEDO; OVALLE, 1995).

Com $\alpha/2 = 0,025$ (nível de significância de 95%) e n -1 graus de liberdade retira-se os valores de $t_{\alpha/2}$ para cada n (número de medições). Para um intervalo de confiança ao nível de 95%,

$t_{\alpha/2}$ para 4 observações = 3,1825

$t_{\alpha/2}$ para 10 observações = 2,2622

Para o cálculo da variação percentual em torno da média:

$$\text{Variação} = \text{Intervalo} \times 100 / \bar{x} \quad (20)$$

4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 PROGRAMA DE REDE NEURONAL

Um programa computacional desenvolvido em MATLAB utilizando o Neural Networks Toolbox, foi gerado para se obter os conjuntos de parâmetros para cada rede treinada. Este programa proporciona facilidade na escolha da melhor arquitetura, que envolve a variação de parâmetros da rede, tais como o η variável ou fixo, número máximo de iterações, intervalo de normalização, número de neurônios na camada oculta e funções de transferência. Com tanta flexibilidade, o número total de redes testadas para cada conjunto de dados chega aos milhares, obtendo-se a melhor arquitetura que se ajusta aos dados ou o melhor conjunto de parâmetros para cada variável estudada.

O programa utiliza os três tipos de função de transferência, sigmoidal (logsig), tangencial (tansig) e linear (purelin), combinando duas a duas (camada oculta e de saída) para a otimização da arquitetura. Utilizou-se computadores com processadores pentium II e III para executar o programa, pois quanto maior a capacidade de processamento, mais rápido torna-se o treinamento da rede neuronal.

4.2 CROMATOGRAFIA GASOSA COM DETECTOR DE IONIZAÇÃO DE CHAMA

4.2.1 Composição Química da Gasolina

Do processo de refino do petróleo, resulta uma mistura extremamente complexa de hidrocarbonetos, contendo um grande número de compostos diferentes. A composição básica de uma de suas frações mais importantes, a gasolina, está descrita a seguir:

- a) alcanos: são os hidrocarbonetos saturados, também conhecidos como parafinas (cadeia linear) e isoparafinas (cadeia ramificada);
- b) ciclanos: são os hidrocarbonetos saturados de cadeia cíclica, também conhecidos como naftênicos;

- c) aromáticos: hidrocarbonetos ligados em anel aromático ou benzênico;
- d) alcenos: são os hidrocarbonetos insaturados (de dupla ligação), também denominados olefinas;
- e) sulfurados: hidrocarbonetos contendo o heteroátomo enxofre;
- f) nitrogenados: compostos contendo o heteroátomo nitrogênio;
- g) oxigenados: compostos contendo o heteroátomo oxigênio.

4.2.2 Análise PIANO

É uma análise fundamental para caracterização de gasolina (ZHU et al., 1999) que revela a quantidade relativa de hidrocarbonetos:

- % n- parafinas (P)
- % isoparafinas (I)
- % aromáticos (A)
- % naftênicos (N)
- % olefinas (O)

O uso de cromatografia gasosa, particularmente com multicolunas para este tipo de análise, tem sido extensivamente investigadas (KAPUR; SINGH; SARPAL, 2000). Um grande número de métodos tem sido descritos na literatura, os quais empregam sistemas com colunas simples ou múltiplas com configurações variadas.

Uma análise que fornece um nível adicional de informação (ZHU et al., 1999) é a separação e identificação dos muitos compostos possíveis em uma simples coluna capilar de alta resolução, para então somá-los de modo a fornecer a informação requerida.

4.2.3 Condições Cromatográficas e Equipamento

O cromatógrafo utilizado para a análise detalhada da composição química da gasolina é um CG-FID Varian CP-3800, apresentado na figura 4.1. A análise por DHA (“Detailed Hydrocarbon Analysis”) permite o reconhecimento das substâncias pertencentes à gasolina através de um procedimento de calibração interna; sendo

assim, as condições cromatográficas que fornecem a melhor resolução para este tipo de análise são:

- a) gás de arraste na coluna: hélio, velocidade linear = 30.0 a 30.2 cm/s a 35°C;
- b) detector: FID, temperatura: 300°C, sensibilidade: 32×10^{-12} , alimentação: hidrogênio, ar e nitrogênio;
- c) injetor: 250°C;
- d) razão de split: 200:1, fluxo: 285-415 cc/min;
- e) coluna: 100 m x 0.25 mm de sílica fundida com 0.5 micron de metil silicone, especificada como CP-SIL PONA CB FS 100X.25 (0.5) da Chrompack Capillary Column;
- f) programa de temperatura: 35°C por 15 minutos, rampa de 1 grau/min até 60°C, patamar de 20 minutos, rampa de 2 graus/min até 200°C e patamar de 10 minutos;
- g) tempo total de análise: 140 minutos.



FIGURA 4.1 – CROMATÓGRAFO CG – FID.
FONTE: LACAUT / UFPR

4.2.4 Software DHA: Detailed Hydrocarbon Analysis

Análise detalhada de hidrocarbonetos (DHA) é um método de análise utilizado para caracterizar várias frações do petróleo e produtos. As amostras são analisadas por cromatografia gasosa, em temperatura programada, em uma coluna capilar de 100 m

de alta resolução que separa os hidrocarbonetos de acordo com sua volatilidade relativa. Compostos individuais são identificados por comparação de seus índices de retenção Kovats ou linear ¹ com uma biblioteca de compostos, cujo comportamento de eluição foi caracterizado sob condições idênticas. As porcentagens mássicas, volumétricas e molares são computadas e reportadas para cada composto. Também são agrupadas e reportadas em parafinas, isoparafinas, aromáticos, naftênicos, olefinicos, oxigenados e compostos com eluição maior que o C14. Os dados também podem ser agrupados por número de átomos de carbono por molécula.

O software DHA possui uma grande vantagem em relação às análises clássicas de cromatografia, pois consegue identificar e classificar os inúmeros compostos da gasolina rapidamente. A necessidade de curvas de calibração de muitos padrões é suprimida pelo fator de resposta ao detector existente para cada composto dentro da biblioteca, que é uma espécie de fator de correção levando em consideração a resposta de cada um em relação ao detector de ionização de chama. A grande maioria dos hidrocarbonetos possui um fator de resposta próximo a um. Entretanto, os compostos aromáticos possuem um fator de resposta próximo a 0,9, enquanto que os oxigenados possuem um fator mais alto, próximo a 1,7. O fator de resposta para o etanol necessitou de uma correção, já que sua quantidade máxima prevista em outros países não é apropriada para os padrões nacionais. O fator de resposta utilizado equivale a uma curva de calibração externa, que é montada a partir de padrões com diversas

¹ O índice de retenção linear é aplicável para condições com gradiente de eluição: (CIOLA, 1973):

$$RI_p = RI_1 + (RI_2 - RI_1) \times (RT_p - RT_1) / (RT_2 - RT_1)$$

Onde:

RI₁ = índice de retenção do pico de referência mais próximo eluindo antes de RT_p.

RT₁ = tempo de retenção do pico de referência mais próximo eluindo antes de RT_p.

RI₂ = índice de retenção do pico de referência mais próximo eluindo depois de RT_p.

RT₂ = tempo de retenção do pico de referência mais próximo eluindo depois de RT_p.

RT_p = tempo de retenção do pico o qual se quer calcular o índice de retenção.

Neste sistema, considera-se que o índice de retenção para picos de uma série homóloga de parafinas são múltiplos de 100. Ex: n-butano possui índice de retenção no valor de 400, enquanto que o n-octano possui índice de retenção no valor de 800.

concentrações. Esse ajuste do fator de resposta para o etanol seguiu o seguinte procedimento:

- a) injetou-se uma amostra de gasolina A para comprovar a ausência do pico do etanol. Uma gasolina do tipo A é aquela que sai da refinaria, sem adição de etanol anidro;
- b) adicionou-se uma quantidade de 25% de etanol na gasolina A, obtendo-se uma solução de concentração conhecida em etanol;
- c) injetou-se esta solução de gasolina A e etanol e quantificou-se no DHA verificando se a mesma estava certa. Mudou-se o fator de resposta de 1,67 (proveniente de fábrica) gradativamente até que o programa identificasse a concentração correta;
- d) o fator de resposta do etanol é então fixado em 1,8 para a gasolina tipo C. Uma gasolina do tipo C é aquela com a quantidade de etanol anidro estipulada pelo governo, para comercialização automotiva.

A identificação dos picos é definida pela construção ou modificação de uma tabela de referência de picos. Com uma mistura de padrões é possível identificar, por semelhança e ordem de eluição, diversos picos de referência e construir uma tabela de referência inicial, fornecendo o tempo de retenção de cada pico identificado para cada índice de retenção de uma biblioteca (PIANO library). O software localiza os tempos de retenção atuais desses picos durante a calibração e os utiliza para prever os tempos de retenção e desvio aceitável para cada composto da biblioteca PIANO, ou seja, situa todos os compostos da biblioteca nas condições atuais de análise. Um pico é identificado como um composto específico se seu tempo de retenção estiver dentro da variação aceitável e tiver o tempo de retenção mais próximo do esperado para o composto.

A identificação dos picos de uma amostra qualquer se processa conforme dois tipos de calibração. A calibração externa ocorre quando uma gasolina padrão devidamente identificada pelo DHA é comparada com a amostra que então é caracterizada. Na padronização externa, os picos de referência do padrão são utilizados como picos de referência na amostra. Este tipo de calibração é eficiente somente

quando as amostras estão muito próximas da composição química do padrão externo, pois uma pequena variação no tempo de retenção ou no tamanho do pico é o suficiente para que uma falsa identificação ocorra. Na calibração interna, os picos de referência da amostra são fornecidos para que a identificação se processe. Ou seja, para cada amostra é montada uma tabela de picos de referência sem que haja necessidade de padrão externo, mesmo se as condições de fluxo ou pressão na coluna variem um pouco. Escolheu-se a calibração interna porque a mesma ajusta-se a qualquer tipo de amostra a ser analisada. As calibrações internas ou externas são utilizadas apenas para fins qualitativos e não quantitativos como na cromatografia clássica. Servem apenas para indicar alguns picos de referência pré-selecionados na amostra (quando for interna) ou padrão (quando for externa), para que o programa encontre e identifique corretamente os outros picos, situados **entre** os picos de referência.

4.3 AMOSTRAS

As amostras utilizadas são de gasolina comum coletadas em recipiente próprio, de vidro âmbar e armazenadas em local fresco. Foram selecionadas conforme seção 5.2. utilizando-se o infravermelho portátil, IROX 2000 da Grabner Instruments apresentada na figura 4.2.



FIGURA 4.2 – IROX 2000.
FONTE: LACAUT / UFPR

4.4 ENSAIOS ASTM E NBR

4.4.1 Densidade Relativa a 20°C – Método do Densímetro Automático

O equipamento utilizado neste estudo é o densímetro automático modelo DMA 4500 da Antoon Paar apresentado na figura 4.3, que determina a densidade da gasolina a 20 °C em g/cm³. Este ensaio atende às normas ASTM D 4052 /NBR 14065.

A amostra é introduzida, com auxílio de uma seringa, em um tubo capilar em forma de U, vibrando com frequência definida. Um banho controlado ajusta a temperatura da amostra a 20°C. A modificação da frequência, provocada pela introdução da amostra, em conjunto com os parâmetros de calibração determina a massa específica da amostra, na temperatura escolhida (DMA, 2001). O tempo de análise para este método é de dois minutos. A densidade da gasolina está relacionada à características de estocagem, mas também pode indicar presença de contaminantes.



FIGURA 4.3 – DENSÍMETRO DIGITAL
FONTE: LACAUT / UFPR

4.4.2 Pressão de Vapor Reid – Método Mini

O aparelho de pressão de vapor, modelo Minivap VPS da Grabner Instruments (figura 4.4.) é utilizado nas análises das amostras de gasolina. Este ensaio atende à norma ASTM D 5191.

Pressão de vapor Reid é a medida da pressão total de 1 ml de amostra com ar saturado a 37,8°C (100°F) dentro de uma câmara de 5 ml. Mede a volatilidade da gasolina.

A amostra é inserida dentro do aparelho (MINIVAP, 2001) quando a temperatura da célula de medição está em 20°C. A célula é automaticamente lavada com 2.5 ml do líquido a ser medido para afastar qualquer possibilidade de contaminação. Após este procedimento, a célula de medição é cheia com 1 ml da amostra. Ocorre uma primeira expansão com o trabalho de um pistão até um volume de 1.7 ml e a temperatura aumenta para 37,8°C. Após um tempo de equilíbrio de 3 minutos ocorre a medida da pressão. Ocorre um segundo avanço do pistão até o volume de 2.5 ml, com nova medida de pressão. Finalmente a terceira expansão se dá até o volume de 5 ml, com o tempo de equilíbrio e medida da pressão. Das três medidas de pressão, a correção dos gases dissolvidos é realizada. A pressão de vapor Reid é calculada a partir da terceira medida de pressão a 5 ml, por uma fórmula empírica segundo a norma ASTM D 5191. O tempo estimado de análise é de cinco minutos.

O controle da pressão de vapor está ligado à segurança no transporte e armazenamento da gasolina, além de limitar possíveis perdas por evaporação. Também está diretamente relacionada com o problema de “vapor lock” no motor, que é o crescimento de minúsculas bolhas na linha de abastecimento de combustível, comprometendo a eficiência da bomba, já que a mesma puxa vapor ao invés de líquido (KAWAKAMI; SHIKADA; MIYAO, 1999). A presença de leves é necessária, pois auxilia a partida a frio do motor.



FIGURA 4.4 – APARELHO MEDIDOR DE PRESSÃO DE VAPOR.

FONTE: LACAUT / UFPR

4.4.3 Curva de Destilação – Método da Destilação Atmosférica

Este ensaio atende às normas ASTM D 86 e NBR 9619.

Os equipamentos disponíveis em laboratório para este estudo são:

- a) Destilador automático Herzog mod. HDA628 (master) n.s. 6280977 e 6280978 (máquina 1 e 3).
- b) Destilador automático Herzog mod. HDA627 (slave) n.s. 16271209 e 16271208 (máquina 2 e 4).

A figura 4.5 mostra os equipamentos disponíveis em laboratório para realização dos ensaios de curva de destilação.



FIGURA 4.5 – DESTILADORES AUTOMÁTICOS.

FONTE: LACAUT/UFPR

NOTA: o modelo à esquerda refere-se ao “master”,
que controla o da direita (“slave”)

4.4.3.1 Terminologia (NBR 9619)

PIE – Ponto inicial de ebulição: é a leitura corrigida do termômetro que é observada no instante que a primeira gota de condensado cai na extremidade mais baixa do tubo condensador .

PFE – Ponto final de ebulição: é a máxima temperatura corrigida do termômetro obtida durante o teste. Esta geralmente ocorre depois da evaporação de todo líquido do fundo do frasco.

Porcentagem recuperada: o volume de condensado observado na proveta coletora, expresso como a porcentagem do volume carregado, associado com a leitura simultânea da temperatura.

Ponto seco: a leitura do termômetro corrigida que é observada no instante em que a última gota de líquido (excluindo quaisquer gotas ou película de líquido nas paredes do frasco ou do sensor de temperatura) evapora da parte mais baixa do fundo do frasco. Existe uma aproximação deste ponto para o ponto final de ebulição em amostras onde não se consegue diferenciá-los.

4.4.3.2 Descrição Sucinta do Ensaio

Neste ensaio, 100 ml de gasolina é evaporado e condensado sob condições padronizadas. A taxa de destilação da amostra deve estar entre 4 a 5 ml/min, proporcionando uma destilação uniforme ao longo do tempo. O condensado é recolhido em uma proveta graduada calibrada, permitindo a leitura do volume de destilado. São feitas observações sistemáticas de temperatura a cada volume especificado de condensado, possibilitando o levantamento da curva de destilação do produto. É um teste básico de determinação das características de volatilidade do combustível, sendo utilizado para verificar se as proporções leves e pesadas do combustível produzido estão adequadas, visando obter uma boa performance na combustão. É utilizado também para detecção de contaminação com outros produtos leves ou pesados. A especificação define valores máximos de temperatura para os pontos 10%, 50% e 90% evaporados ou recuperados, além do ponto final de ebulição (PFE) e o resíduo da destilação. O tempo de análise para destilar uma amostra de gasolina comum é de 40 minutos (em média).

4.4.3.3 Relevância do Ensaio

Ao destilar-se a gasolina, mistura complexa de hidrocarbonetos com número de carbonos variando de 4 a 12, obtemos dados a respeito de seu desempenho em um motor. Os dados mais importantes são:

- a) PIE → ponto inicial de ebulição. É o ponto de bolha da gasolina, relacionado diretamente com o teor de voláteis na gasolina. É importante para a partida do motor a frio.
- b) T_{10} → temperatura na qual 10% (em volume) do líquido foi destilado. Está relacionada com a partida do motor a frio. Voláteis em excesso ocasionam o “vapor lock”.
- c) T_{50} → temperatura na qual 50% do líquido foi destilado. Está relacionada com o aquecimento do motor (temperatura ótima de operação).
- d) T_{90} → temperatura na qual 90% do líquido foi destilado. Relaciona-se com a performance e economia do motor, além da temperatura ótima de operação do mesmo. Hidrocarbonetos pesados em excesso podem causar combustão irregular, já que não volatilizam tão fácil e permanecem mais tempo dentro do motor causando a diluição do lubrificante.
- e) PFE → ponto final de ebulição. Relacionado com o teor de hidrocarbonetos pesados.

Os resultados do teste são normalmente expressos como porcentagem recuperada versus temperaturas correspondentes, em uma tabela ou graficamente plotando-se a curva de destilação (figura 4.6).

FIGURA 4.6 – CURVA DE DESTILAÇÃO DE UMA GASOLINA COMUM

Algumas considerações do fabricante (HERZOG, 2000) relevantes para o estudo:

O equipamento possui um sensor DP (Dry Point) que detecta automaticamente o ponto seco, que capta a mudança de temperatura na parte de cima do balão de destilação. A temperatura eleva-se rapidamente após a saída da última gota.

O ponto inicial de ebulição é detectado por um sensor infravermelho de nível. O nível zero da proveta receptora deve ser calibrado cada vez que a mesma é trocada, mesmo sendo do mesmo fabricante ou também quando o equipamento é trocado.

O termômetro utilizado para medida das temperaturas é um PT 100, que possui um material sensível à temperatura (platina) com uma resistência elétrica que muda com a mesma.

O equipamento possui velocidade de destilação controlada que fica entre 4 a 5 ml por minuto.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 ESTUDO PRELIMINAR DAS VARIÁVEIS ENVOLVIDAS

A partir de amostras de gasolina comum coletadas entre janeiro e novembro de 2001 no estado do Paraná, realizou-se uma verificação da composição química, com o objetivo de detectar diferenças entre as amostras de uma população e viabilizar a aplicação de rede neuronal. A redundância dos dados de entrada e saída é prejudicial para um bom ajuste pela rede neuronal. O equipamento utilizado para esta investigação é o IROX 2000 da Grabner Instruments, que é um analisador infravermelho portátil específico para a análise de gasolina. A partir do espectro gerado, este fornece a composição química da gasolina (porcentagem volumétrica de etanol, aromáticos, olefinicos e saturados) comparando-se diversos espectros existentes em seu banco de dados. Este equipamento foi previamente calibrado com amostras de gasolina com composição química conhecida. O objetivo principal deste estudo preliminar é verificar a possibilidade de seleção de amostras em um período reduzido (um ou dois meses).

Para este estudo preliminar as propriedades escolhidas foram: curva de destilação ASTM (PIE, T_{10} , T_{50} , T_{90} e PFE) e densidade relativa a 20°C. Levando-se em conta um período de 11 meses e uma alíquota de 5500 amostras de gasolina comum coletadas no Estado do Paraná, construiu-se gráficos e verificou-se a variabilidade dos dados de entrada (gráficos 5.1 a 5.4) e saída (5.5 a 5.9).

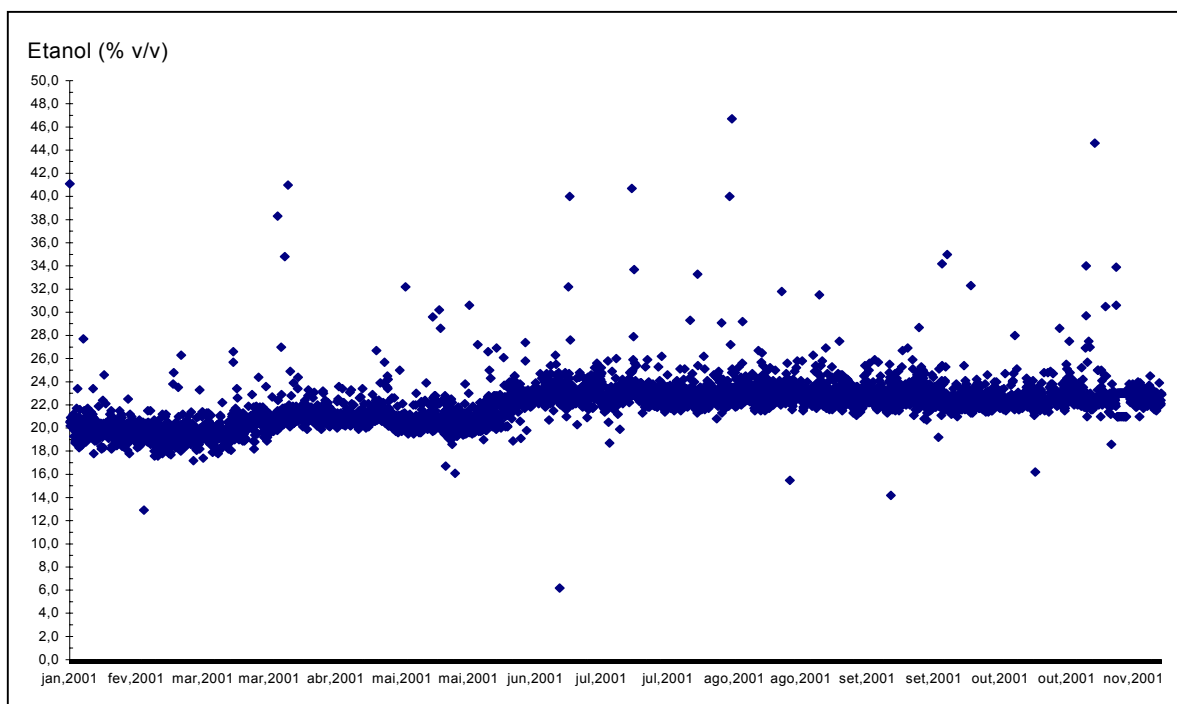


FIGURA 5.1 – VARIAÇÃO DO TEOR DE ETANOL NA GASOLINA COMUM – PARANÁ JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP

NOTA: Dados obtidos através de leitura de 5.327 amostras de monitoramento, por infravermelho.

Observa-se no figura 5.1 que o teor de etanol ao longo do ano tende a uma média de 20 a 21% até o mês de maio e depois muda para 22-23%. Esta mudança ocorreu devido a mudanças na portaria da ANP regulamentando o teor de etanol. Essa tendência à média limita a utilização na rede já que ocorre redundância nos dados. As amostras escolhidas deverão ser diferenciadas da média estatística.

A variação no teor de aromáticos, ilustrada no figura 5.2 revela tendências à faixa de 12 a 16% durante o ano. Observam-se alguns deslocamentos dessa faixa média no início do ano, provavelmente devido a mudanças em condições operacionais de produção ou de matéria-prima.

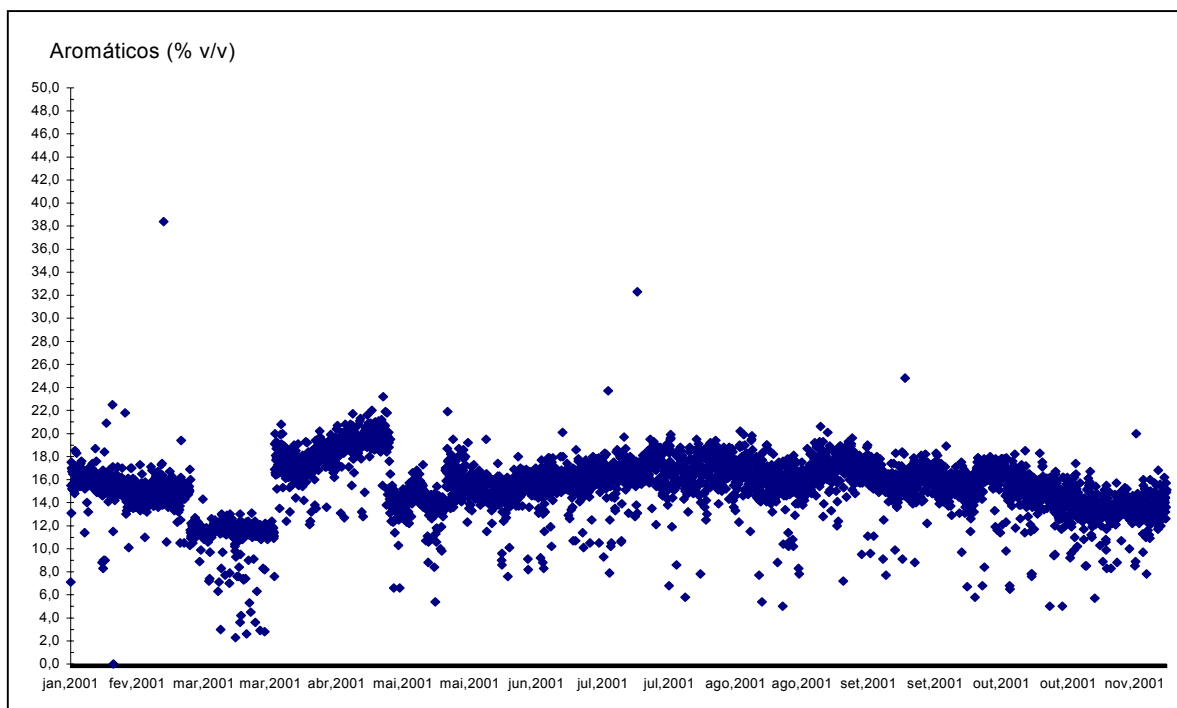


FIGURA 5.2 - VARIAÇÃO DO TEOR DE AROMÁTICOS NA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

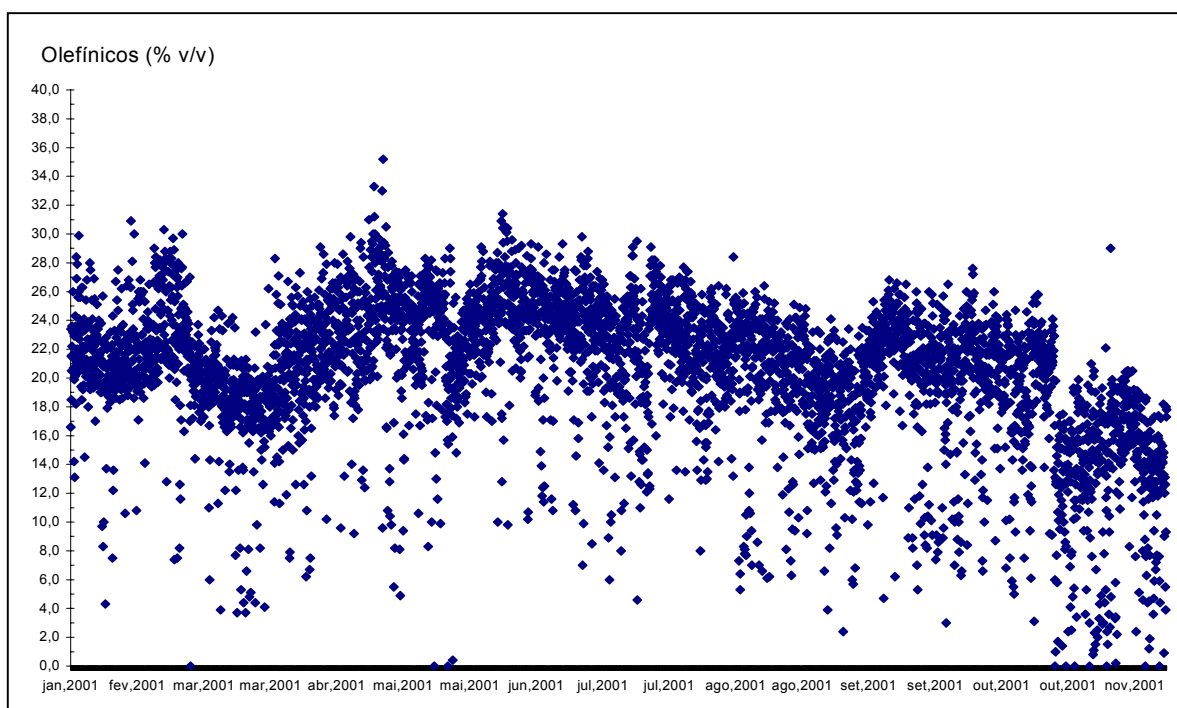


FIGURA 5.3 - VARIAÇÃO DO TEOR DE OLEFÍNICOS NA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

A variação do teor de olefinicos observada na figura 5.3 é grande ao longo do ano, o que pode ser muito interessante como dado de entrada para a rede. Ou seja, para duas amostras que contenham o mesmo teor de etanol e aromáticos, podem ser diferenciadas no teor de olefinicos, e a rede neuronal poderá captar esta diferença.

A variação do teor de saturados (figura 5.4) durante o ano também pode ser considerada boa, embora exista uma tendência a algumas faixas de concentração.

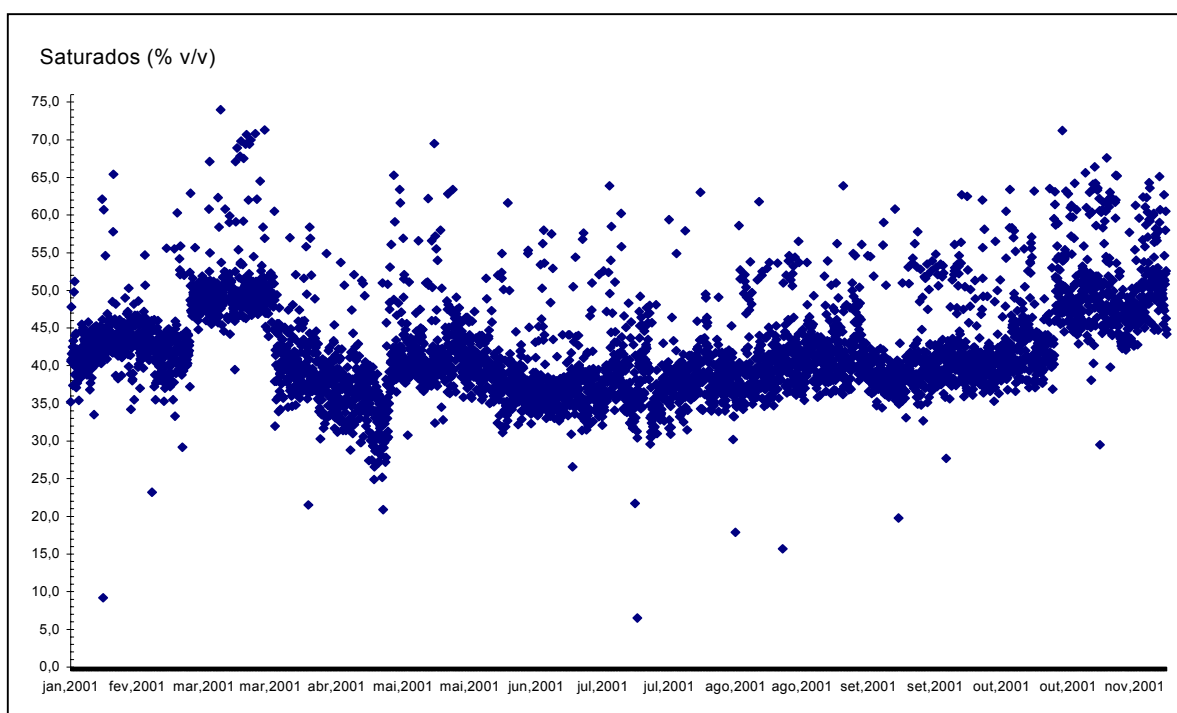


FIGURA 5.4 - VARIAÇÃO DO TEOR DE SATURADOS NA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP.

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

Para as variáveis de entrada, pode-se concluir que o cuidado na seleção das amostras deve levar em conta a existência de variações no teor de etanol.

A variação na densidade relativa da gasolina durante o ano (figura 5.5) está em uma faixa de 0,7550 a 0,7650 g/cm³. Apesar da grande variação na composição química, a variação na densidade da gasolina não é muito grande (faixa estreita), o que não é bom para a rede, já que a necessidade de pontos diferenciados é primordial para que não ocorra “overffiting”. Ao selecionar amostras para a rede,

esta propriedade associada ao teor de etanol deverá obrigatoriamente variar, para que a rede consiga correlacionar essas diferenças.

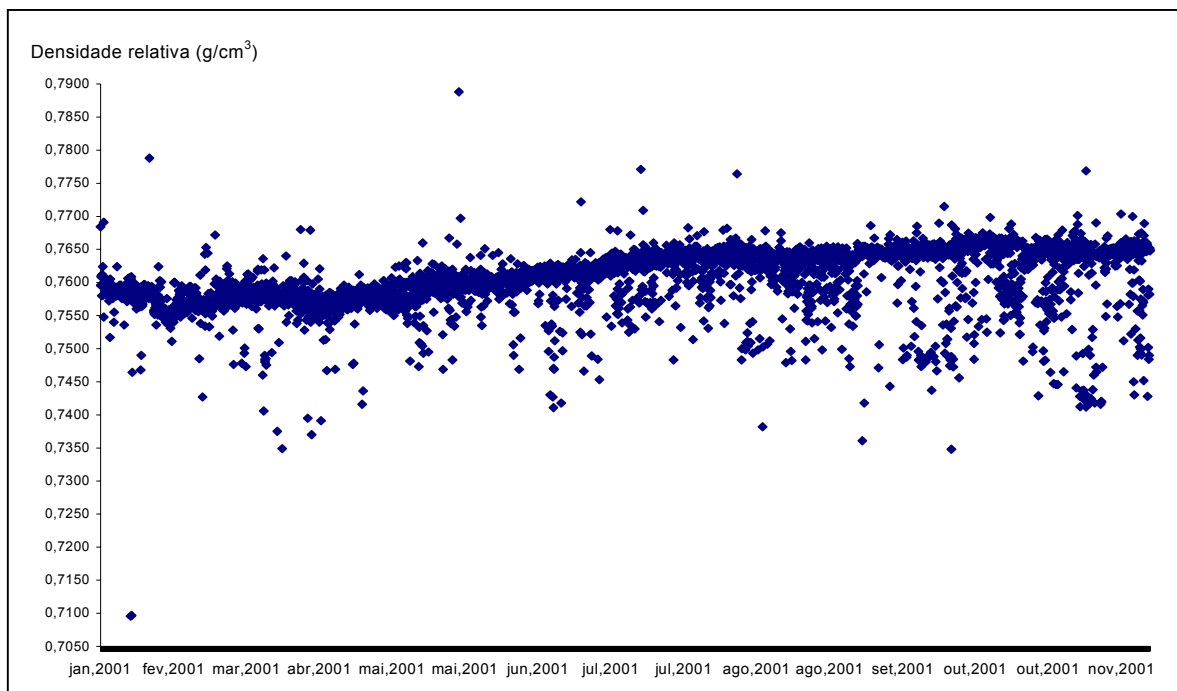


FIGURA 5.5 - VARIAÇÃO DA DENSIDADE RELATIVA A 20 °C DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

Quanto à variação do T_{10} , apesar da tendência à média de 55 °C (figura 5.6) observa-se variabilidade significativa dos valores desta propriedade. A variabilidade do T_{50} também tende a uma média de 72 a 74 °C (figura 5.7), devido às características da gasolina produzida no Paraná.

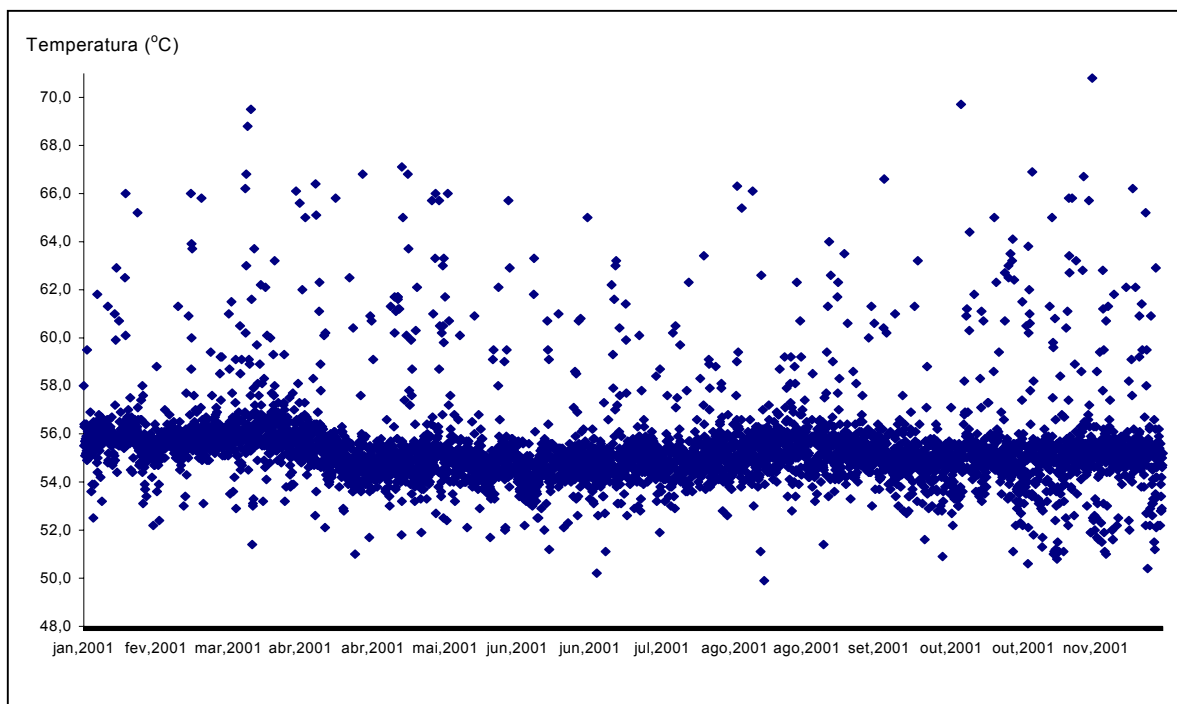


FIGURA 5.6 - VARIAÇÃO DO T_{10} DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP.

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

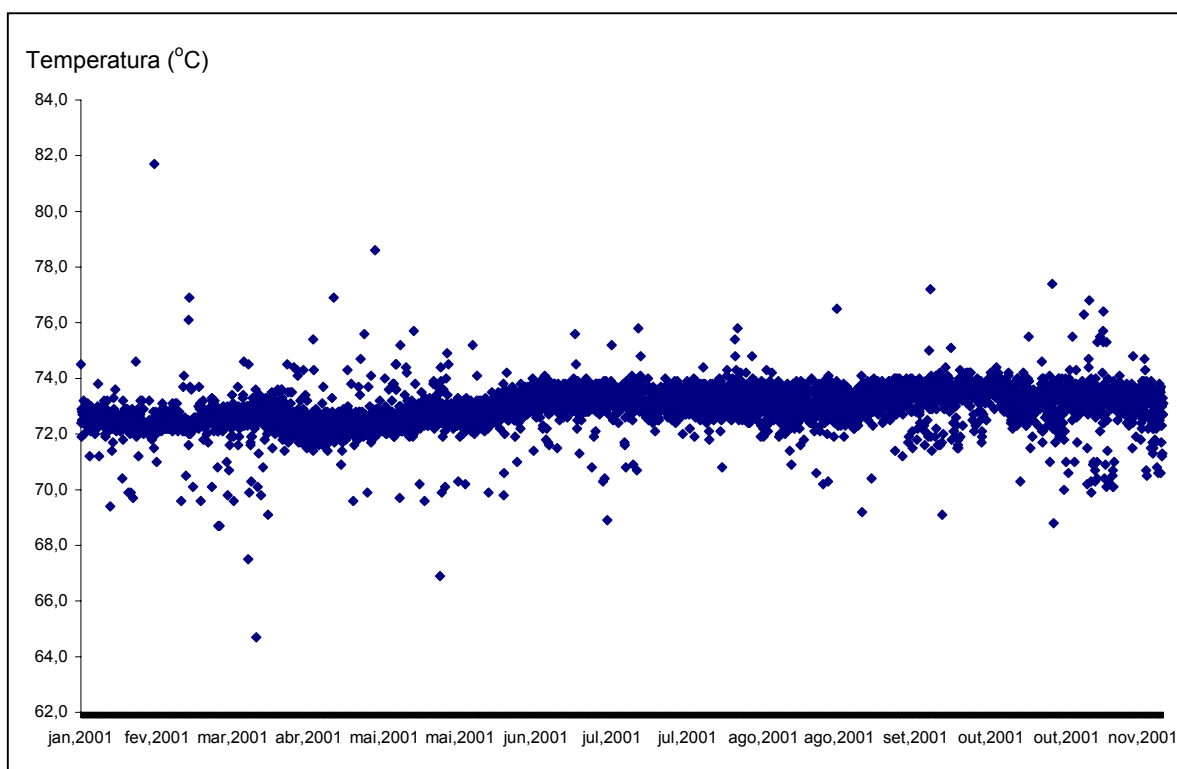


FIGURA 5.7 - VARIAÇÃO DO T_{50} DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP.

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

Para as variáveis T_{90} e PFE, também existe uma tendência à média próxima a 180°C e 215°C respectivamente. Os eventuais desvios da média se devem ao cuidado de armazenamento ou mesmo ao processo de adulteração de suas características básicas (figuras 5.8 e 5.9).

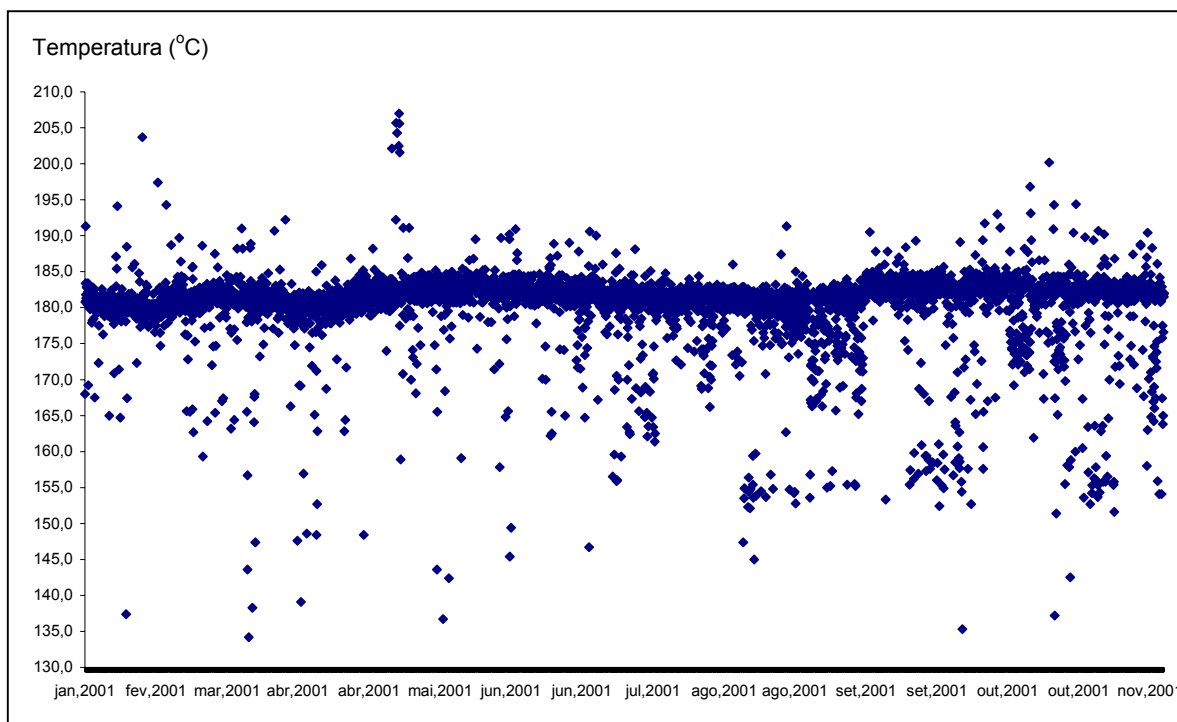


FIGURA 5.8 - VARIAÇÃO DO T_{90} DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP.

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

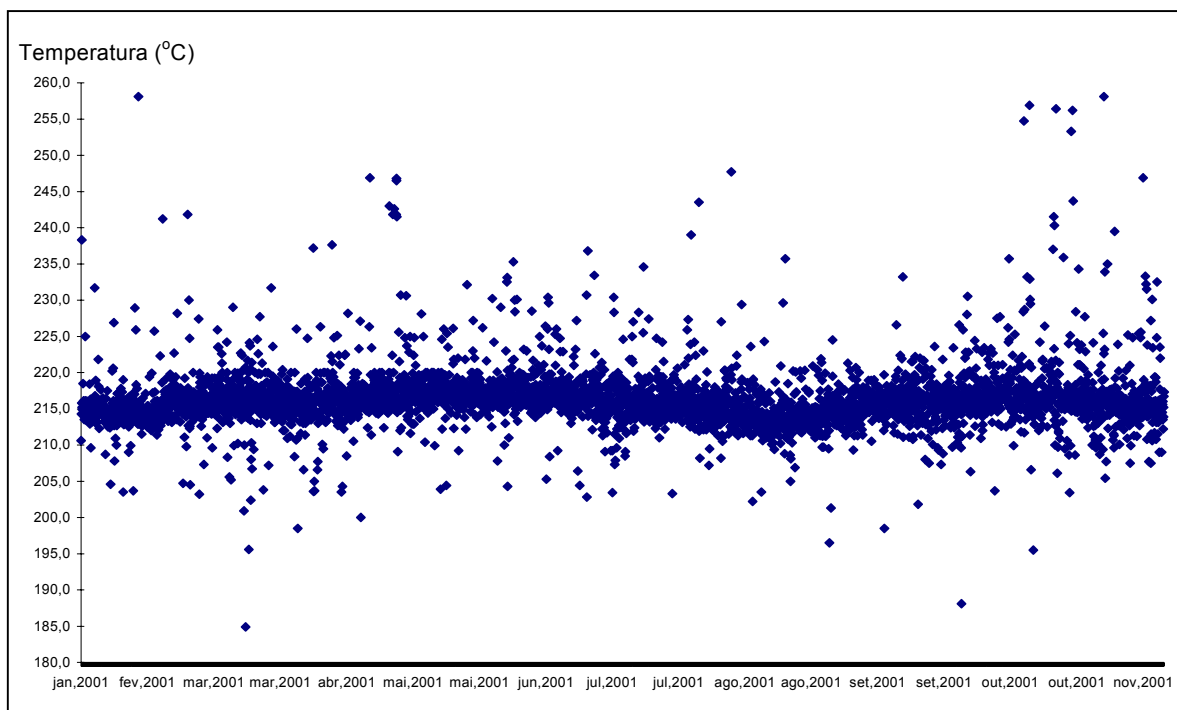


FIGURA 5.9 - VARIAÇÃO DO PFE DA GASOLINA COMUM - PARANÁ - JAN-NOV 2001.

FONTE: Laboratório de Análise de Combustíveis Automotivos – UFPR / ANP.

NOTA: Dados obtidos através de leitura de amostras de monitoramento, por infravermelho.

Com a variabilidade visualizada nos gráficos, concluiu-se que podem ser obtidas as amostras com diferenças significativas na composição química e nas propriedades para aplicação em rede neuronal, tomando-se o cuidado de escolher amostras que possuam teor de etanol, densidade e T_{50} diferenciados da média.

5.2 ESCOLHA DAS AMOSTRAS

Após a detecção de variabilidade nos dados, iniciou-se a escolha das amostras para a rede neuronal. A informação de composição química fornecida pelo IROX 2000 das amostras dos meses de maio e junho do ano de 2002 foi aproveitada para uma prévia tentativa de correlação. Os dados de saída obtidos através dos ensaios rotineiros do laboratório de análise de combustíveis automotivos da UFPR também foram aproveitados. Ao realizar a seleção aleatória das amostras, o conjunto de dados iniciais apresentou uma redundância de dados, forçando a previsão das propriedades à média estatística e comprometendo a capacidade preditiva da rede. Portanto, a estratégia de seleção das amostras foi mudada para evitar a repetição de dados.

Observou-se também que algumas amostras estavam fora ou próximo do limite de detecção do IROX 2000, podendo chegar a resultados errôneos. A partir dessa observação, incluiu-se apenas as amostras que atendiam aos seguintes requisitos:

- a) a gasolina comum é formada por aromáticos, olefínicos, saturados (parafinas, isoparafinas e naftênicos) e o etanol adicionado. Portanto, a soma de % aromáticos, % olefínicos, % etanol (que são detectados pelo equipamento) e % saturados (calculado) deve ser de 100,0%;
- b) o limite máximo escolhido do etanol para este estudo é de 27,0% (dentro do limite de detecção do equipamento que é de 0 até 33,0%);
- c) o limite máximo escolhido de olefínicos para este estudo é de 60,0% (dentro do limite de detecção do equipamento que é de 0 até 65,0%);
- d) o limite mínimo escolhido de saturados para este estudo é de 32,0% (dentro do limite inferior de detecção do equipamento que é de 26,0 até 100,0%);
- e) aromáticos não possuem limite de detecção.

A nova seleção de amostras seguiu os seguintes critérios²:

- a) dividiram-se os dados por faixas de densidade. Os limites mínimo e máximo de densidade foram, respectivamente, 0,7400 e 0,7800 g/cm³ e o incremento utilizado foi de 0,0050 g/cm³.
- b) dentro de cada faixa de densidade foram selecionadas aleatoriamente um total de 180 amostras de gasolina;
- c) dentro das 180 selecionadas, reduziu-se para o mínimo possível de amostras, utilizando-se os extremos (máximos e mínimos do teor de aromáticos, olefínicos, saturados e etanol) da composição química;

² “No caso de uma população heterogênea, na qual podemos distinguir subpopulações mais ou menos homogêneas, denominadas estratos, podemos usar a amostragem estratificada. Estratificar uma população é dividi-la em L subpopulações denominados estratos tais que”:

$$n_1 + n_2 + \dots + n_L = n$$

onde os estratos são mutuamente exclusivos. Após a determinação dos estratos, seleciona-se uma amostra aleatória de cada subpopulação” (FONSECA, p.145).

- d) chegou-se ao número de 35 amostras representativas da população inicial que era de 1000 amostras;
- e) as 35 amostras foram então separadas para análise cromatográfica e os ensaios ASTM.

5.3 METROLOGIA E CALIBRAÇÃO DOS EQUIPAMENTOS

Para a aplicação dos dados em rede neuronal, verificou-se e calibrou-se os equipamentos que mediam os dados de entrada (programa DHA), bem como os dados de saída (densímetro automático, aparelho de pressão de vapor e destiladores automáticos). Os testes de repetitividade foram aplicados a todos os equipamentos envolvidos, enquanto que o teste de reprodutividade foi aplicado aos destiladores automáticos, com o objetivo de verificar a variação nas leituras entre os quatro equipamentos disponíveis em laboratório.

5.3.1 Calibração do Programa DHA

Injetou-se um padrão de referência qualitativa de nafta (Supelco) com 89 picos conhecidos nas condições cromatográficas exigidas para a aplicação do DHA. Comparou-se a sequência de eluição apresentada pelo padrão com a sequência apresentada de uma amostra de gasolina analisada pelo DHA, ajustando-se os tempos de retenção para que coincidissem. Muitos desses picos identificados foram então fixados na tabela de referência para que o reconhecimento automático fosse efetuado.

5.3.2 Calibração do Densímetro Automático

O procedimento para calibração do densímetro automático foi realizado conforme orientações do fabricante. Neste procedimento a densidade do ar isento de umidade e de uma água ultrapura é ajustada a valores estabelecidos.

5.3.3 Verificação da Confiabilidade de Calibração do Aparelho de Pressão de Vapor

Os problemas encontrados na medição de pressão de vapor de líquidos são causados pelo fato de que todos os líquidos contêm quantidades variadas de gases dissolvidos (ar primário). Exceto para a água e outras poucas substâncias, o gás contido em um líquido não é conhecido. Quando um líquido é introduzido dentro de uma célula evacuada, o gás dissolvido escapa e forma uma pressão parcial adicionando-se à pressão de vapor do líquido. Como as duas pressões se somam, é impossível determinar a pressão de vapor do líquido verdadeira. O aparelho de pressão de vapor utiliza uma técnica de medição a qual determina exatamente a pressão parcial do ar dissolvido, denominado método de expansão tripla, eliminando o ar primário antes de realizar a leitura.

Foi monitorada a confiabilidade do aparelho de pressão de vapor, lendo-se a pressão absoluta de alguns solventes puros (pureza acima de 99%) tais como: metanol, etanol, 2,2 dimetilbutano (neo-hexano) e n-pentano. Para tal teste realizou-se leituras em triplicata de alguns solventes e comparou-se os valores obtidos com os valores de literatura indicados pelo fabricante do aparelho. Os dados da verificação estão na tabela 5.1.

TABELA 5.1. LEITURAS DE PRESSÃO DE VAPOR PARA VERIFICAÇÃO DO APARELHO.

SOLVENTE	PV abs. referência a 37,8°C (kPa)	PV absoluta (kPa)	Média das leituras	Diferença entre média e referência (%)
Etanol P.A. (99,8%)	15,96	16,1 16,0 16,0	16,03	0,44
Metanol P.A. (99,0%)	31,95	31,9 32,0 32,1	32,0	0,16
n-Pentano P.A. (99,5%)	107,41	107,3 170,4 107,4	107,37	0,04
Neo-hexano P.A. (99,6%)	68,00	⁽¹⁾ 69,2	69,2	1,76

NOTA: (1) A leitura deste solvente foi realizada apenas uma vez, pois a quantidade era limitada.

Como as leituras experimentais e os valores de literatura estavam muito próximos, aceitou-se a calibração do fabricante. A determinação da pressão de vapor Reid para as amostras poderia ser efetuada após teste de repetitividade (vide 5.3.5).

5.3.4 Calibração dos Destiladores Automáticos

Foi efetuada por técnico especializado contratado. Após limpeza dos equipamentos, verificação e ajuste dos sensores ótico, de pressão e temperatura, realizou-se um teste de reprodutibilidade para verificação da qualidade do serviço prestado.

5.3.5 Repetitividade do DHA

O programa DHA fornece as porcentagens volumétricas, mássicas e molares de alguns grupos principais e subgrupos, bem como de cada substância. Os grupos principais e subgrupos considerados neste teste de repetitividade são:

- a) aromáticos: variando de 6 até 15 carbonos (AC6 – AC15);
- b) iso-parafinas: variando de 5 até 12 carbonos (IP5 – IP12);
- c) naftênicos: variando de 5 até 12 carbonos (N5 – N12);
- d) olefínicos: variando de 4 até 16 carbonos (OL4 – OL16);
- e) oxigenados: variando de 2 até 4 carbonos (OX2 – OX4);
- f) parafinas: variando de 3 até 16 carbonos (PF3 – PF16);
- g) desconhecidos: variando de 5 até 13 carbonos (D5- D13)

A tabela 5.2. mostra os resultados das análises por DHA para cada injeção da mesma amostra.

Ao se calcular o desvio padrão experimental para os dados do cromatógrafo gasoso, observou-se (tabela 5.3) que a maior variação em termos percentuais é o do teor de desconhecidos D6 com 25,17% e dos subgrupos IP11 e AC6 com 10,47% e 11,61% de variação em torno da média. Esta variação é aceitável porque, em geral são picos que estão em regiões onde não existe um pico de referência muito próximo, e um pequeno deslocamento no tempo de retenção é suficiente para que ocorra identificação errada. Ao analisar os cromatogramas das 10 injeções, pode-se verificar visualmente que os picos são coincidentes. Estas variações, decorrentes de pequenas falhas de integração, são desprezíveis comparando-se com o conjunto de picos.

TABELA 5.2 - TESTE DE REPETITIVIDADE DA CROMATOGRAFIA COM DHA PARA GASOLINA COMUM.

GRUPOS E SUBGRUPOS	INJEÇÃO (% v/v)									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Aromáticos	16,62	16,75	16,74	16,99	16,80	16,86	16,84	16,88	16,91	16,86
Iso-parafinas	15,44	15,42	15,37	15,41	15,39	15,44	15,38	15,37	15,42	15,33
Naftênicos	7,59	7,56	7,55	7,56	7,55	7,58	7,57	7,58	7,58	7,54
Olefinicos	18,86	18,79	18,74	17,82	18,75	17,87	18,67	18,61	18,68	18,87
Oxigenados	25,24	25,21	25,31	25,22	25,30	25,25	25,28	25,25	24,92	25,27
Parafinicos	7,60	7,69	7,71	7,59	7,64	7,59	7,56	7,56	7,67	7,71
Desconhecidos	8,64	8,58	8,59	9,41	8,57	9,40	8,70	8,76	8,83	8,42
AC6	0,48	0,48	0,48	0,67	0,48	0,67	0,47	0,47	0,47	0,47
AC7	2,15	2,14	2,14	2,15	2,15	2,15	2,15	2,15	2,14	2,14
AC8	4,06	4,17	4,17	4,19	4,17	3,99	4,19	4,21	4,20	4,19
AC9	4,77	4,77	4,77	4,79	4,78	4,80	4,82	4,82	4,81	4,79
AC10	2,96	2,97	2,97	2,98	3,01	3,04	2,99	2,99	3,02	3,04
AC11	1,21	1,21	1,21	1,21	1,21	1,22	1,22	1,22	1,24	1,22
AC12	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,01	1,01	1,01	1,03	1,01
IP5	5,07	5,07	5,04	5,06	5,06	5,05	5,00	4,99	5,03	4,99
IP6	3,94	3,93	3,92	3,93	3,93	3,93	3,92	3,91	3,92	3,91
IP7	2,35	2,35	2,34	2,35	2,34	2,35	2,35	2,35	2,35	2,35
IP8	1,77	1,77	1,77	1,77	1,76	1,77	1,77	1,78	1,78	1,77
IP9	1,64	1,63	1,62	1,62	1,62	1,60	1,63	1,64	1,64	1,63
IP10	0,59	0,59	0,59	0,60	0,59	0,65	0,60	0,61	0,61	0,60
IP11	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,07	0,07	0,05	0,05
IP12	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04
N5	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24	0,24
N6	1,77	1,76	1,76	1,76	1,76	1,77	1,76	1,76	1,76	1,76
N7	2,45	2,45	2,44	2,45	2,45	2,46	2,45	2,45	2,45	2,45
N8	2,16	2,15	2,15	2,16	2,15	2,16	2,16	2,17	2,17	2,16
N9	0,82	0,79	0,79	0,79	0,78	0,80	0,79	0,79	0,79	0,79
N10	0,10	0,11	0,11	0,10	0,11	0,10	0,11	0,11	0,11	0,09
N12	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06	0,06
OL4	0,83	0,83	0,83	0,83	0,83	0,83	0,80	0,80	0,82	0,81
OL5	9,03	8,99	8,98	8,98	8,99	8,97	8,90	8,88	8,93	8,90
OL6	5,76	5,79	5,76	4,82	5,75	4,73	5,77	5,74	5,73	5,98
OL7	1,77	1,77	1,76	1,77	1,76	1,77	1,77	1,77	1,77	1,77
OL8	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74	0,74
OL9	0,60	0,55	0,55	0,55	0,55	0,60	0,55	0,55	0,56	0,55
OL12	0,09	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10	0,10
OL13	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04
OX2	25,22	25,19	25,29	25,21	25,28	25,24	25,26	25,23	24,90	25,26
OX4	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02
PF4	0,72	0,81	0,85	0,72	0,78	0,71	0,69	0,70	0,78	0,86
PF5	2,13	2,12	2,12	2,11	2,12	2,11	2,10	2,09	2,10	2,10
PF6	1,42	1,42	1,41	1,42	1,42	1,41	1,42	1,41	1,42	1,41
PF7	1,29	1,28	1,28	1,29	1,28	1,29	1,29	1,28	1,29	1,28
PF8	1,46	1,46	1,46	1,47	1,46	1,47	1,47	1,47	1,47	1,46
PF9	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,26	0,25
PF10	0,11	0,11	0,11	0,12	0,11	0,11	0,11	0,11	0,12	0,11
PF11	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09
PF12	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09	0,09
PF13	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,05	0,06	0,05
D5	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0,13	0,13	0,13	0,13
D6	0,93	0,86	0,88	1,70	0,91	1,70	0,88	0,90	0,93	0,63
D7	1,06	1,06	1,06	1,07	1,06	1,07	1,08	1,10	1,07	1,08
D8	1,04	0,99	0,98	0,99	0,98	1,02	0,98	0,99	0,99	0,97
D9	0,68	0,70	0,69	0,68	0,69	0,64	0,70	0,72	0,72	0,72
D10	1,21	1,22	1,22	1,22	1,16	1,17	1,24	1,25	1,24	1,18
D11	1,79	1,80	1,80	1,80	1,80	1,82	1,83	1,83	1,85	1,84
D12	1,63	1,64	1,66	1,66	1,65	1,67	1,68	1,67	1,72	1,68
D13	0,17	0,18	0,17	0,17	0,19	0,17	0,19	0,17	0,18	0,19

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.3 – CÁLCULO DA INCERTEZA DE MEDIÇÃO PARA DHA

GRUPOS E SUBGRUPOS	CÁLCULO DE INCERTEZA (% v/v)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Variação
Aromáticos	16,82	0,10	0,03	16,99	16,62	0,07	0,44
Iso-parafinas	15,40	0,04	0,01	15,44	15,33	0,03	0,17
Naftênicos	7,57	0,02	0,01	7,59	7,54	0,01	0,17
Olefínicos	18,57	0,39	0,12	18,87	17,82	0,28	1,50
Oxigenados	25,23	0,11	0,04	25,31	24,92	0,08	0,32
Parafínicos	7,63	0,06	0,02	7,71	7,56	0,04	0,57
Desconhecidos	8,79	0,34	0,11	9,41	8,42	0,25	2,79
AC6	0,51	0,08	0,03	0,67	0,47	0,06	11,61
AC7	2,15	0,00	0,00	2,15	2,14	0,00	0,13
AC8	4,15	0,07	0,02	4,21	3,99	0,05	1,25
AC9	4,79	0,02	0,01	4,82	4,77	0,01	0,29
AC10	3,00	0,03	0,01	3,04	2,96	0,02	0,69
AC11	1,22	0,01	0,00	1,24	1,21	0,01	0,53
AC12	1,01	0,01	0,00	1,03	1,00	0,01	0,52
IP5	5,03	0,03	0,01	5,07	4,99	0,02	0,45
IP6	3,92	0,01	0,00	3,94	3,91	0,01	0,18
IP7	2,35	0,00	0,00	2,35	2,34	0,00	0,13
IP8	1,77	0,01	0,00	1,78	1,76	0,00	0,23
IP9	1,63	0,01	0,00	1,64	1,60	0,01	0,49
IP10	0,60	0,02	0,01	0,65	0,59	0,01	2,29
IP11	0,06	0,01	0,00	0,07	0,05	0,01	10,47
IP12	0,04	0,00	0,00	0,04	0,04	0,00	0,93
N5	0,24	0,00	0,00	0,24	0,24	0,00	0,25
N6	1,76	0,00	0,00	1,77	1,76	0,00	0,14
N7	2,45	0,00	0,00	2,46	2,44	0,00	0,13
N8	2,16	0,01	0,00	2,17	2,15	0,00	0,21
N9	0,79	0,01	0,00	0,82	0,78	0,01	0,89
N10	0,10	0,01	0,00	0,11	0,09	0,01	5,53
N12	0,06	0,00	0,00	0,06	0,06	0,00	0,78
OL4	0,82	0,01	0,00	0,83	0,80	0,01	0,93
OL5	8,95	0,05	0,02	9,03	8,88	0,04	0,39
OL6	5,58	0,43	0,14	5,98	4,73	0,31	5,53
OL7	1,77	0,00	0,00	1,77	1,76	0,00	0,14
OL8	0,74	0,00	0,00	0,74	0,74	0,00	0,18
OL9	0,56	0,02	0,01	0,60	0,55	0,01	2,65
OL12	0,10	0,00	0,00	0,10	0,09	0,00	0,64
OL13	0,04	0,00	0,00	0,04	0,04	0,00	2,44
OX2	25,21	0,11	0,04	25,29	24,90	0,08	0,32
OX4	0,02	0,00	0,00	0,02	0,02	0,00	1,25
PF4	0,76	0,06	0,02	0,86	0,69	0,04	5,78
PF5	2,11	0,01	0,00	2,13	2,09	0,01	0,36
PF6	1,42	0,00	0,00	1,42	1,41	0,00	0,12
PF7	1,28	0,00	0,00	1,29	1,28	0,00	0,14
PF8	1,47	0,00	0,00	1,47	1,46	0,00	0,19
PF9	0,25	0,00	0,00	0,26	0,25	0,00	0,43
PF10	0,11	0,00	0,00	0,12	0,11	0,00	1,98
PF11	0,09	0,00	0,00	0,09	0,09	0,00	0,74
PF12	0,09	0,00	0,00	0,09	0,09	0,00	1,16
PF13	0,05	0,00	0,00	0,06	0,05	0,00	1,65
D5	0,13	0,00	0,00	0,14	0,13	0,00	0,87
D6	1,03	0,36	0,11	1,70	0,63	0,26	25,17
D7	1,07	0,01	0,00	1,10	1,06	0,01	0,79
D8	0,99	0,02	0,01	1,04	0,97	0,02	1,51
D9	0,69	0,02	0,01	0,72	0,64	0,02	2,41
D10	1,21	0,03	0,01	1,25	1,16	0,02	1,74
D11	1,82	0,02	0,01	1,85	1,79	0,01	0,79
D12	1,67	0,03	0,01	1,72	1,63	0,02	1,11
D13	0,18	0,01	0,00	0,19	0,17	0,01	3,24

FONTE: LACAUT / UFPR

onde:

Média: média aritmética das leituras

D padrão: desvio padrão experimental (equação 17).

DP média: desvio padrão experimental da média: s / \sqrt{n} , $n=10$

Maior: maior leitura observada

Menor: menor leitura observada

Intervalo +/-: DP média x $t_{\alpha/2}$ para 10 observações = 2,2622.

Variação: variação do intervalo de confiança em porcentagem (equação 20).

5.3.6 Repetitividade do Densímetro Automático

Realizou-se 30 leituras de densidade de uma mesma amostra para o cálculo de incerteza de medição. O cálculo para a incerteza é o mesmo para todos os equipamentos, variando-se apenas o cálculo do intervalo +/- que utiliza $z_{\alpha/2} = 1,96$ para 30 observações.

TABELA 5.4 – LEITURAS DE DENSIDADE DA GASOLINA COMUM PARA TESTE DE REPETITIVIDADE

LEITURA N°	densidade (g/cm ³)	LEITURA N°	densidade (g/cm ³)
1	0,7680	16	0,7686
2	0,7684	17	0,7684
3	0,7680	18	0,7684
4	0,7680	19	0,7685
5	0,7680	20	0,7686
6	0,7684	21	0,7684
7	0,7684	22	0,7688
8	0,7680	23	0,7693
9	0,7684	24	0,7684
10	0,7680	25	0,7682
11	0,7686	26	0,7684
12	0,7685	27	0,7683
13	0,7683	28	0,7691
14	0,7682	29	0,7682
15	0,7687	30	0,7682

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.5 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO PARA O DENSÍMETRO AUTOMÁTICO

PROPRIEDADE	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Variação
DENSIDADE	0,7684	0,00031	0,00006	0,7693	0,7680	0,00011	0,015

FONTE: LACAUT / UFPR

O densímetro automático possui uma variação aceitável de 0,015% nas leituras de uma mesma amostra.

5.3.7 Repetitividade do Aparelho de Pressão de Vapor

Realizou-se 30 leituras de PV absoluta e PV Reid de uma amostra de gasolina comum para avaliar sua repetitividade (cálculo de incertezas). O cálculo da incerteza de medição é igual ao anterior.

TABELA 5.6 – LEITURAS DE PRESSÃO DE VAPOR REID PARA TESTE DE REPETITIVIDADE.

LEITURA N°	P.V. Reid (kPa)	LEITURA N°	P.V. Reid (kPa)
1	49,6	16	49,3
2	49,5	17	49,2
3	49,5	18	49,3
4	49,5	19	49,2
5	49,5	20	49,2
6	49,4	21	49,2
7	49,5	22	49,2
8	49,4	23	49,1
9	49,4	24	49,1
10	49,4	25	49,1
11	49,3	26	49,1
12	49,4	27	49,1
13	49,4	28	49,1
14	49,3	29	49,1
15	49,3	30	49,1

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.7 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO PARA O APARELHO DE PRESSÃO DE VAPOR

PROPRIEDADE	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Variação
P.V.REID	49,29	0,16	0,03	49,6	49,1	0,06	0,11

FONTE: LACAUT / UFPR

A variação na incerteza de medição da PV Reid para a gasolina comum é de 0,11%. O equipamento apresentou boa repetitividade e com isto, não deverá influenciar nos resultados das análises da pressão de vapor Reid das amostras de gasolina comum.

5.3.8 Repetitividade dos Destiladores Automáticos

Para cada máquina disponível em laboratório, realizou-se 10 destilações de uma mesma amostra, para teste de repetitividade. A calibração dos equipamentos foi realizada por técnico especializado antes de qualquer análise. O cálculo da incerteza de medição muda apenas para o intervalo +/- que utiliza $t_{\alpha/2}$ para 10 observações = 2,2622. Os resultados das leituras e cálculos estão apresentados a seguir.

TABELA 5.8 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 1

DESTIL Nº	VOLUME RECUPERADO														
	PIE	5%	10%	15%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	85%	90%	95%	PFE
1	39,3	50,1	54,8	58,3	61,5	66,6	70,7	73,3	74,8	115,5	143,7	157,3	173,2	189,6	212,3
2	39,7	50,4	55,1	58,6	61,5	66,5	70,5	73,2	74,9	116,3	145,0	158,5	172,5	190,2	212,2
3	40,2	50,5	55,3	58,9	61,7	66,8	70,8	73,3	75,1	116,5	145,1	158,6	173,3	189,8	211,4
4	39,3	50,0	54,9	58,6	61,5	66,7	70,6	73,2	74,9	116,1	144,5	157,8	172,3	189,6	212,9
5	40,3	50,3	55,1	58,7	61,7	66,7	70,7	73,5	75,4	115,9	144,6	158,5	173,4	188,9	212,3
6	40,3	50,9	55,5	58,9	61,9	66,9	70,8	73,5	75,7	116,6	145,3	158,3	173,2	190,1	211,3
7	40,7	50,3	55,1	58,6	61,6	66,5	70,6	73,3	75,1	116,1	144,9	159,8	173,8	189,4	212,8
8	...	50,2	54,7	58,3	61,4	66,4	70,4	73,4	75,2	115,6	143,6	158,7	172,3	190,1	210,6
9	40,7	49,8	54,8	59,3	61,1	66,3	70,3	73,1	74,8	114,5	143,5	156,9	172,7	189,6	210,9
10	42,0	50,0	55,0	58,8	61,4	66,4	70,3	73,1	74,9	114,7	143,8	159,3	173,1	...	211,4

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.9 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 1

VOLUME RECUPERADO	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Variação
PIE	40,3	0,83	0,26	42,0	40,2	0,60	1,48
10%	55,0	0,25	0,08	55,5	54,7	0,18	0,32
50%	73,3	0,14	0,05	73,5	73,1	0,10	0,14
90%	173,0	0,51	0,16	173,8	172,3	0,36	0,21
PFE	211,8	0,80	0,25	212,9	210,6	0,57	0,27

FONTE: LACAUT / UFPR

TABELA 5.10 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 2

DESTIL. Nº	VOLUME RECUPERADO														
	PIE	5%	10%	15%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	85%	90%	95%	PFE
1	39,1	50,2	55,1	58,7	61,7	66,9	71,0	73,8	75,9	116,3	145,1	157,6	172,4	190,3	213,6
2	40,2	50,7	55,2	58,8	61,9	66,8	71,0	73,8	75,6	116,4	145,9	157,8	173,8	189,6	213,0
3	40,6	51,5	55,8	59,3	62,3	67,0	71,1	73,8	75,7	117,6	146,3	159,4	172,5	190,4	213,0
4	40,6	50,7	55,4	58,8	61,8	66,9	70,9	73,7	75,9	115,5	149,7	159,6	172,6	189,9	211,0
5	41,4	50,8	55,5	59,0	62,0	66,9	70,9	73,8	76,0	117,0	145,0	159,3	174,1	190,5	212,2
6	41,9	50,8	55,7	59,0	62,0	66,8	70,8	73,8	76,0	116,5	144,8	158,7	173,6	190,0	211,8
7	41,5	50,8	55,4	58,9	61,9	66,7	70,8	73,6	76,0	116,8	144,7	159,7	173,2	190,2	212,9
8	41,6	50,6	55,1	58,8	61,8	66,7	70,8	73,6	75,9	115,0	146,0	158,9	172,3	190,8	212,1
9	42,0	50,8	55,4	58,9	61,8	66,9	70,9	73,6	75,9	115,8	145,8	159,3	172,8	190,8	211,2
10	41,6	50,4	55,1	58,7	61,7	66,7	70,8	73,7	75,9	114,7	145,1	159,0	172,5	189,7	212,9

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.11 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 2

VOLUME RECUPERADO	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Varição
PIE	41,1	0,91	0,29	42,0	39,1	0,65	1,59
10%	55,4	0,25	0,08	55,8	55,1	0,18	0,32
50%	73,7	0,09	0,03	73,8	73,6	0,07	0,09
90%	173,0	0,65	0,21	174,1	172,3	0,46	0,27
PFE	212,4	0,85	0,27	213,6	211,0	0,61	0,29

FONTE: LACAUT / UFPR

TABELA 5.12 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 3

DESTIL. Nº	VOLUME RECUPERADO														
	PIE	5%	10%	15%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	85%	90%	95%	PFE
1	38,7	49,8	54,4	58,3	61,2	66,7	70,6	73,4	75,5	116,6	145,2	158,6	172,6	189,9	211,9
2	40,0	50,4	55,0	58,5	61,1	66,6	70,6	73,3	75,4	115,9	144,1	159,5	171,8	190,1	211,1
3	40,6	50,4	55,1	58,3	61,6	66,8	70,7	73,5	75,5	117,8	145,0	158,1	171,7	190,1	211,1
4	40,8	50,8	55,1	58,5	61,5	66,2	70,4	73,4	75,5	114,3	144,8	159,2	172,3	189,6	211,3
5	41,1	50,7	55,1	58,6	61,7	66,5	70,5	73,2	75,6	118,3	145,2	159,3	173,1	190,8	212,3
6	41,5	50,4	54,9	58,5	61,3	66,4	70,5	73,3	75,4	115,2	145,5	156,8	173,1	189,4	213,0
7	41,2	50,3	55,0	58,4	61,4	66,4	70,5	73,3	75,4	115,0	146,1	159,3	173,6	189,6	212,4
8	40,8	50,0	54,7	58,3	61,4	66,3	70,4	73,3	75,3	115,0	144,8	159,1	173,2	189,7	211,7
9	41,9	50,6	55,1	58,6	61,5	66,5	70,5	73,4	75,3	116,4	146,3	158,2	173,9	189,6	212,0
10	42,1	50,3	54,9	58,4	61,4	66,4	70,4	73,3	75,5	115,6	145,1	159,1	173,7	189,7	211,6

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.13 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 3

VOLUME RECUPERADO	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Varição
PIE	40,9	0,98	0,31	42,1	38,7	0,70	1,72
10%	54,9	0,23	0,07	55,1	54,4	0,16	0,29
50%	73,3	0,08	0,03	73,5	73,2	0,06	0,08
90%	172,9	0,77	0,24	173,9	171,7	0,55	0,32
PFE	211,8	0,61	0,19	213,0	211,1	0,44	0,21

FONTE: LACAUT / UFPR

TABELA 5.14 – LEITURAS PARA TESTE DE REPETITIVIDADE – DESTILADOR 4

DESTIL Nº	VOLUME RECUPERADO														
	PIE	5%	10%	15%	20%	30%	40%	50%	60%	70%	80%	85%	90%	95%	PFE
1	40,6	49,8	54,5	58,3	61,3	66,5	70,9	73,8	75,8	119,4	147,3	160,8	174,6	191,9	214,1
2	40,5	50,7	55,0	58,7	59,1	66,8	71,0	73,6	75,5	120,6	147,5	159,3	176,4	191,1	208,8
3	40,5	51,3	55,6	59,2	62,0	67,0	71,0	74,0	75,6	120,6	147,8	161,6	176,1	192,3	209,0
4	40,4	50,0	54,8	58,4	61,3	66,7	70,9	73,5	75,5	119,0	144,8	159,8	175,7	191,9	208,0
5	40,4	51,1	55,6	58,3	61,8	67,1	71,0	73,9	76,2	120,4	145,8	161,5	176,1	193,0	213,3
6	41,6	50,9	55,5	59,0	61,8	66,9	71,0	73,6	75,5	120,2	146,4	161,7	176,1	192,8	214,6
7	41,3	50,6	55,2	58,7	61,6	66,4	70,8	73,6	76,2	120,3	147,1	159,0	175,7	192,1	213,5
8	42,0	49,9	54,8	58,4	61,3	66,5	70,7	73,4	75,4	118,8	146,0	160,4	174,5	192,4	207,5
9	41,9	50,8	55,3	58,8	61,5	66,7	70,8	73,5	75,5	119,4	144,1	161,4	174,8	192,6	213,6

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local, tempo e equipamento.

TABELA 5.15 – INCERTEZA DE MEDIÇÃO DO DESTILADOR 4

VOLUME RECUPERADO	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Variação
PIE	41,0	0,67	0,22	42,0	40,4	0,52	1,26
10%	55,1	0,39	0,13	55,6	54,5	0,30	0,55
50%	73,7	0,20	0,07	74,0	73,4	0,15	0,21
90%	175,6	0,73	0,24	176,4	174,5	0,56	0,32
PFE	211,4	2,95	0,98	214,6	207,5	2,27	1,07

FONTE: LACAUT / UFPR

Pode-se observar que a maior variabilidade em termos percentuais é do ponto inicial de ebulição, o qual é detectado pela máquina por um sensor infravermelho.

5.3.9 Reprodutibilidade dos Destiladores Automáticos

Para o teste de reprodutibilidade, uma mesma amostra foi destilada nos quatro equipamentos. Os resultados das leituras e cálculo estão apresentados na tabela 5.15 e 5.16. O $t_{\alpha/2}$ para 4 observações = 3,1825 é utilizado para calcular o intervalo +/-.

TABELA 5.16 - LEITURAS PARA TESTE DE REPRODUTIBILIDADE DOS DESTILADORES.

VOLUME RECUPERADO	REPRODUTIBILIDADE			
	Destilador 1	Destilador 2	Destilador 3	Destilador 4
PIE	39,9	40,7	40,2	42,6
5%	51,3	51,7	51,4	52,3
10%	55,7	56,4	56,0	56,9
15%	59,2	59,7	59,4	60,0
20%	62,1	62,6	62,1	62,8
30%	66,8	67,3	66,7	67,3
40%	70,3	70,9	70,5	71,0
50%	72,8	73,5	73,2	73,6
60%	74,6	75,4	75,2	75,5
70%	118,4	119,0	118,0	119,4
80%	141,6	143,2	143,5	143,2
85%	155,9	157,1	155,4	155,9
90%	170,6	172,4	171,8	171,7
95%	188,7	189,3	188,9	189,0
PFE	213,6	213,3	213,0	213,6

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: Teste efetuado em condições iguais para amostra, observador, local e tempo, variando-se apenas os equipamentos.

TABELA 5.17 - TESTE DE REPRODUTIBILIDADE ENTRE OS DESTILADORES

VOLUME RECUPERADO	CÁLCULO DE INCERTEZA (°C)						
	Média	D padrão	DP média	Maior	Menor	Intervalo +/-	Variação
PIE	40,9	1,21	0,61	42,6	39,9	1,93	4,72
10%	56,3	0,52	0,26	118,0	40,2	0,83	1,47
50%	73,3	0,36	0,18	73,6	72,8	0,57	0,78
90%	171,6	0,75	0,38	172,4	170,6	1,19	0,70
PFE	213,4	0,29	0,14	213,6	213,0	0,46	0,21

FONTE: LACAUT / UFPR

Caso fossem utilizados todos os destiladores para destilar as 35 amostras de gasolina, o erro de medição inserido seria maior que os erros de medição individuais para todos os pontos verificados. A maior variação em torno da média de 4,72% para o ponto inicial de ebulição indica que a utilização de todos os destiladores pode inserir, no mínimo, este erro de medição. Para reduzi-lo, escolheu-se o destilador número 4 que apresenta a melhor repetitividade para o PIE e com isto o erro de medição fica em torno de 1,26%; assim, todas as 35 destilações foram realizadas na máquina 4 escolhida, embora a variação para os outros pontos seja um pouco maior (ver tabela 5.18).

TABELA 5.18 – COMPARAÇÃO DAS INCERTEZAS DE MEDIÇÃO ENTRE OS DESTILADORES AUTOMÁTICOS.

Destilador	INCERTEZA DE MEDIÇÃO (%)				
	PIE	T ₁₀	T ₅₀	T ₉₀	PFE
1	1,48	0,32	0,14	0,21	0,27
2	1,59	0,32	0,09	0,27	0,29
3	1,72	0,29	0,08	0,32	0,21
4	1,26	0,55	0,21	0,32	1,27
todos	4,72	1,47	0,78	0,70	0,21

FONTE: LACAUT / UFPR

5.4 REDE NEURONAL

A faixa de parâmetros de rede explorados para as propriedades estudadas é a seguinte:

Número de amostras para treino: 25.

Número de amostras para teste: 10.

Número máximo de iterações: 20 000.

Função de transferência (camada oculta): logsig, tansig e purelin. (vide eq. 10, 11 e 12).

Função de transferência (camada de saída): logsig, tansig e purelin.

Faixa de normalização (entrada e saída): 0,2 a 0,8 e 0,3 a 0,7

Fator de amortecimento (η) fixo: 0,1 a 0,9 com incrementos de 0,02. Valores acima de 0,9 desestabilizaram o processo iterativo, com a ocorrência de oscilações nos erros de treinamento.

Fator de amortecimento (α) variável: 0,01 a 10 com multiplicador incremental e decremental de 5%.

Neste caso optou-se por uma rede com camada oculta única, para que a arquitetura seja simples, com menor número de parâmetros de rede a serem ajustados. As variáveis de entrada neste estudo são: a composição química principal da gasolina (porcentagem de aromáticos, olefínicos, naftênicos, parafínicos, isoparafínicos, oxigenados e desconhecidos) e uma outra mais detalhada na forma de subgrupos. As variáveis de saída são a densidade relativa a 20°C, a pressão de vapor Reid a curva de destilação (ponto inicial, T₁₀, T₅₀, T₉₀ e ponto final de destilação). Para cada variável de saída, uma arquitetura de rede neuronal é otimizada.

O programa gera randomicamente os pesos e os bias, podendo ser necessário uma outra tentativa de estimativa inicial, já que a convergência às vezes não é satisfatória. Foram testados os dois tipos de fator de amortecimento: o fixo e o variável. O número total estimado de arquiteturas de redes chega em 2.000 para cada variável quando se utiliza o η fixo, enquanto que para o η variável é testado aproximadamente 180 tipos de arquiteturas. Ambos os tipos de fator de amortecimento chegaram a resultados muito próximos, sendo então de grande vantagem o uso do η variável, já que o tempo destinado ao treinamento é muito menor. O total geral de arquiteturas testadas de rede por retropropagação chegou a 15.400.

Algumas variáveis de entrada foram descartadas através de análise dos pesos, tais como as entrada referentes aos pesados (C14+) da composição química principal, já que existiam em poucas amostras e em quantidade ínfima. A redução de variáveis de entrada para certas propriedades, como a pressão de vapor Reid, ponto inicial de ebulição, T_{90} e ponto final de ebulição, foi realizada, já que é a proporção de compostos leves e pesados da gasolina que estão relacionados diretamente com tais propriedades.

O banco de dados utilizados para gerar as redes neuronais para cada propriedade está apresentado no apêndice 1, enquanto que a arquitetura da melhor rede observada encontra-se no anexo 1. As tabelas e gráficos referentes aos desvios de treinamento e validação estão no apêndice 2.

5.5 ANÁLISE CROMATOGRÁFICA E PROGRAMA DHA

O programa DHA consegue identificar a grande maioria dos compostos mais significativos, porém não estão catalogados em sua biblioteca os compostos nitrogenados e sulfurados, bem como alguns picos olefinicos e aromáticos. A quantidade de desconhecidos em uma amostra com características normais atinge aproximadamente 8%, entretanto não houve necessidade de baixar esse valor através de identificação mais detalhada por espectro de massa, para fornecer a composição química para a rede neuronal. Normalmente são detectados entre 500 a 600 picos em uma amostra de gasolina típica, porém são identificados aproximadamente 250. Um

exemplo de cromatograma de uma gasolina típica, com o pico do etanol em destaque, está apresentado na figura 5.10.

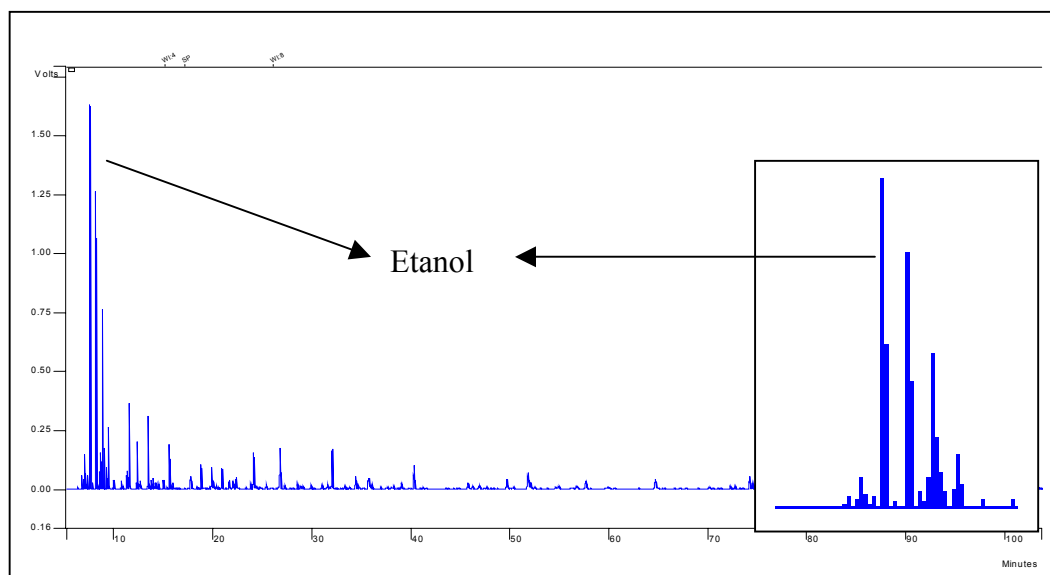


FIGURA 5.10 – CROMATOGRAMA TÍPICO DE UMA GASOLINA COMUM.

FONTE: LACAUT / UFPR

NOTA: A ampliação no quadro à direita demonstra o pico do etanol e sua separação com relação aos outros picos de hidrocarbonetos.

Dos três tipos de relatórios gerados pelo DHA utilizou-se 2 deles como entrada para a rede neuronal: um com grupos principais e o outro com classificação de subgrupos por número de carbono.

5.6 PREVISÃO DA DENSIDADE RELATIVA A 20°C

Foram utilizadas 25 amostras de gasolina para treino e 10 para teste para todas as propriedades envolvidas.

Como a densidade está relacionada diretamente com todos os compostos presentes na gasolina, utilizou-se as 66 variáveis de entrada possíveis. Estas variáveis representam toda a faixa composicional e são:

- Aromáticos: AC6, AC7, AC8, AC9, AC10, AC11, AC12, AC13, AC14 e AC15.
- C14+: C14 e C15.
- Iso parafinas: IC5, IC6, IC7, IC8, IC9, IC10, IC11 e IC12.

- Naftênicos: NC5, NC6, NC7, NC8, NC9, NC10 e NC12. Nota-se que não existe o NC11. O programa DHA não identificou em nenhuma das amostras este subgrupo.
- Olefinas: OLC4, OLC5, OLC6, OLC7, OLC8, OLC9, OLC10, LC11, OLC12, OLC13, OLC14, OLC15 e OLC16.
- Oxigenados: OXC2, OXC3 e OXC4.
- Parafinas: PC3, PC4, PC5, PC6, PC7, PC8, PC9, PC10, PC11, PC12, PC13, PC14, PC15 e PC16.
- Desconhecidos: DC5, DC6, DC7, DC8, DC9, DC10, DC11, DC12 e DC13.

Após encontrar a correlação entre as 66 variáveis de entrada e a densidade, decidiu-se minimizar o número de variáveis de entrada utilizando-se uma composição química mais geral da gasolina, por agrupamentos de substâncias com mesma função química (análise PIANO).

As 7 variáveis de entrada utilizadas são (em % volumétrica):

- | | |
|-----------------|-----------------|
| • Aromáticos | • Oxigenados |
| • Iso-parafinas | • Parafinas |
| • Naftênicos | • Desconhecidos |
| • Olefinas | |

A redução das variáveis de entrada foi aplicada a todas as propriedades em estudo. Para efeito comparativo, nomeia-se rede complexa a arquitetura de rede neuronal obtida a partir da composição química mais detalhada e rede simples a arquitetura correspondente à rede com 7 variáveis de entrada. De uma forma geral, pode-se dizer que a rede complexa utiliza o máximo de informação, enquanto que a simples utiliza o mínimo de informação necessária para se encontrar a correlação.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: 7

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **15 012**

Intervalo de normalização: **0,2 – 0,8**

Média quadrática dos erros dos pontos de treino: **0,000049904**

Média quadrática dos erros dos pontos de teste: **0,000290786**

Arquitetura da melhor rede (simples):

Número de neurônios da camada oculta: **10**

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **6 502**

Intervalo de normalização: **0.2 – 0.8**

Média quadrática dos erros dos pontos de treino: **0.00021088**

Média quadrática dos erros dos pontos de teste: **0.00035936**

O ajuste de dados foi realizado com sucesso, sendo que os desvios existentes entre a densidade experimental e a calculada pela rede neuronal não ultrapassaram 0,5% em ambos os tipos de rede. A estimativa inicial dos pesos convergiu para um mínimo um pouco melhor que o alcançado pela rede mais complexa, melhorando a previsão da densidade para a rede simples (figuras 5.14 e 5.15). Mesmo assim, considerando-se que os valores dos desvios médios estão muito próximos (média de 0,13% para a rede complexa e 0,11% para a mais simples), não existe diferença na previsão de uma para outra rede. Uma ilustração de arquitetura da rede simples obtida para esta variável está apresentada na figura 5.11. O cálculo dos desvios médios está apresentado no apêndice 2.

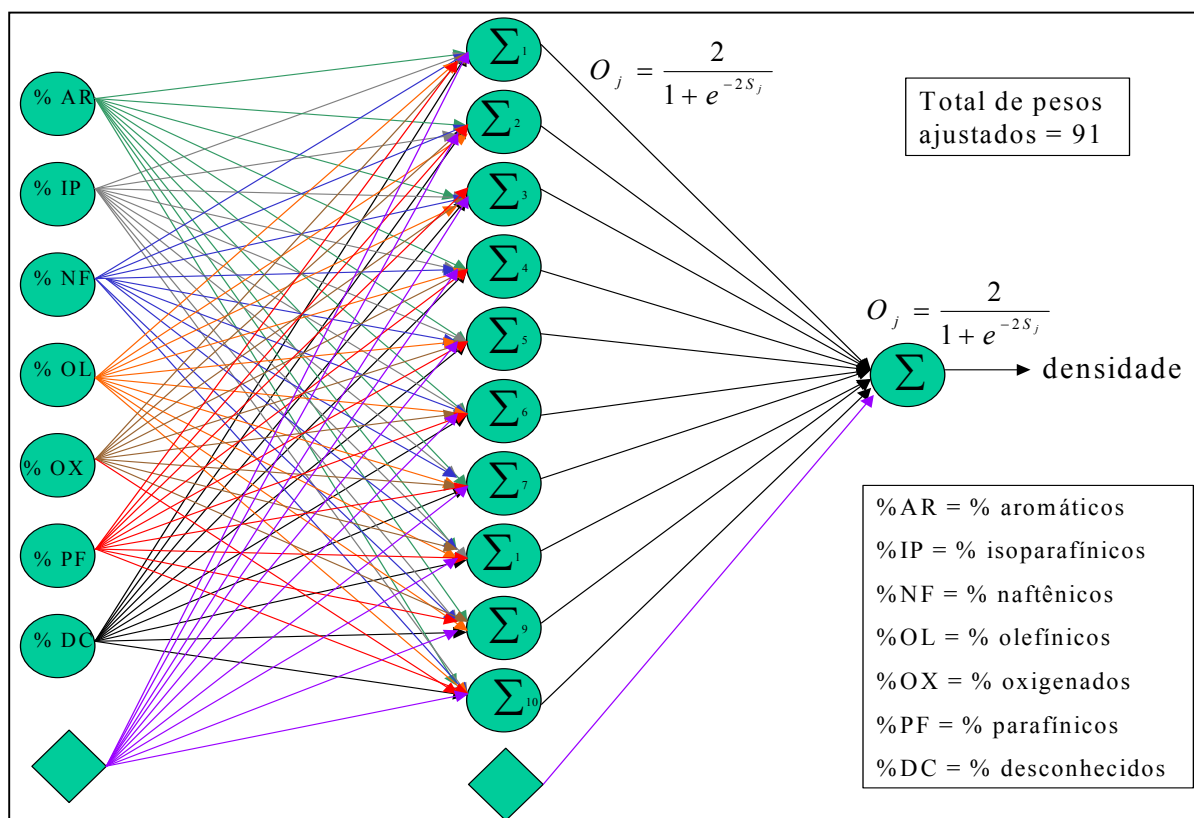


FIGURA 5.11 - ARQUITETURA DA MELHOR REDE OBTIDA PARA PREVISÃO DE DENSIDADE.

As figuras 5.12 e 5.13 mostram os pontos experimentais versus o calculado pela rede complexa e simples, respectivamente, enquanto que as figuras 5.14 e 5.15 ilustram os desvios relativos de previsão. Todos se referem à validação.

Um desvio relativo é a diferença entre o ponto experimental e o calculado pela rede, comparado com o valor experimental:

$$\text{Desvio} = (\text{experimental} - \text{calculado}) / \text{experimental} \times 100 \quad (21)$$

Os gráficos de treinamento estão apresentados no apêndice 2, bem como as tabelas com os pontos experimentais e calculados de todas as propriedades estudadas.

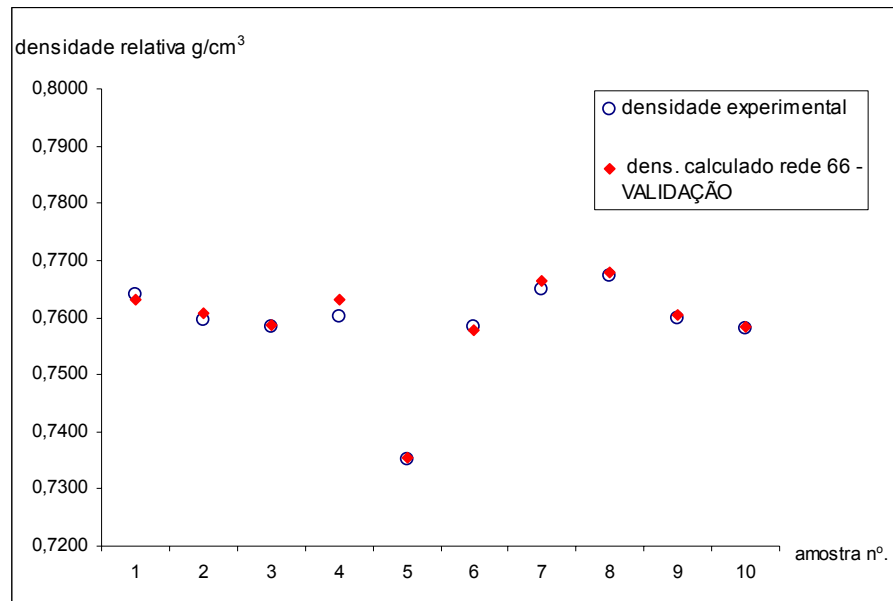


FIGURA 5.12 - DENSIDADE EXPERIMENTAL X DENSIDADE CALCULADA PELA REDE COMPLEXA.

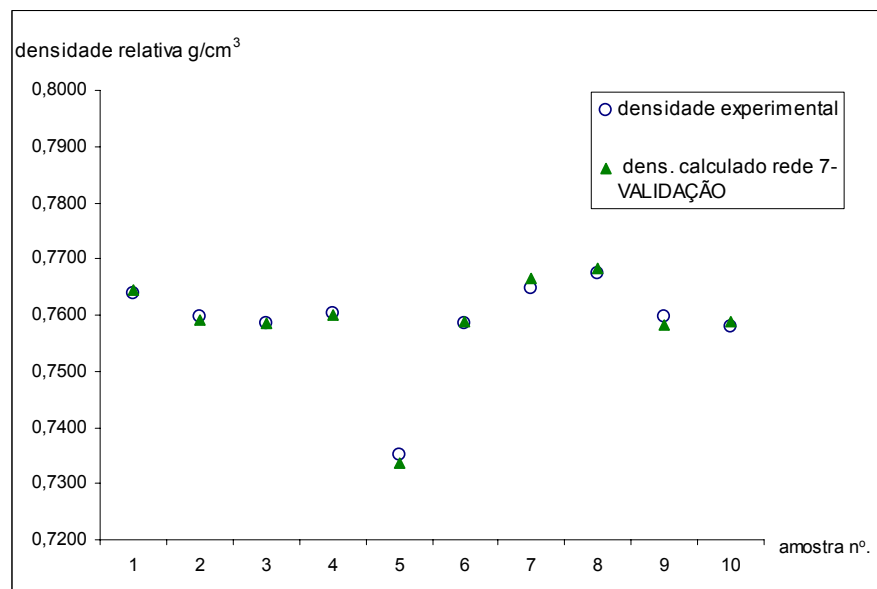


FIGURA 5.13 - DENSIDADE EXPERIMENTAL x DENSIDADE CALCULADA PELA REDE SIMPLES

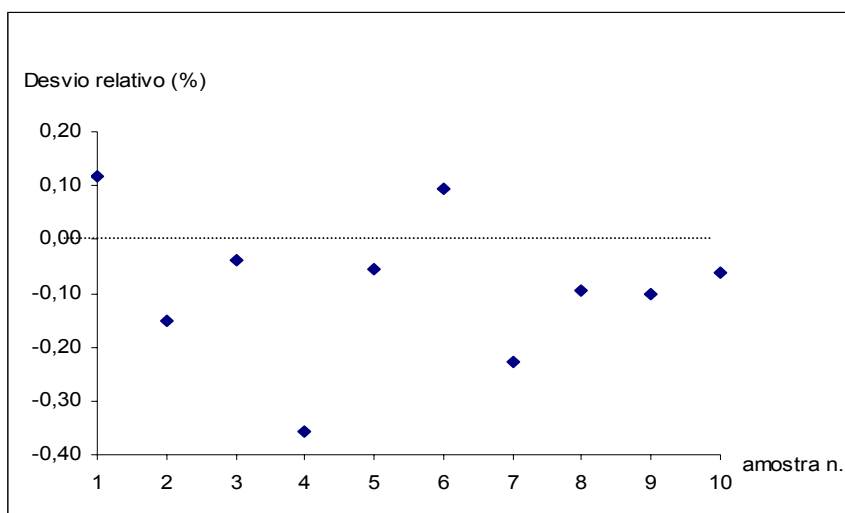


FIGURA 5.14 - DESVIOS DE PREVISÃO DE DENSIDADE PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.

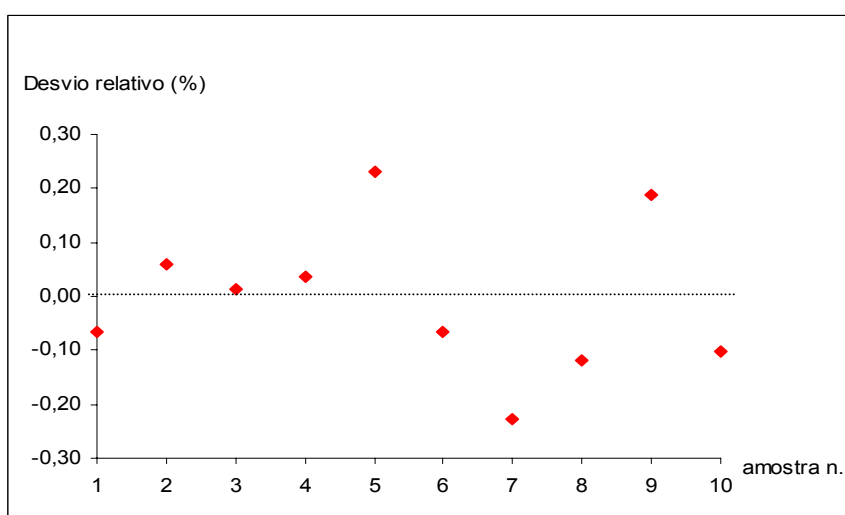


FIGURA 5.15 – DESVIOS DE PREVISÃO DE DENSIDADE PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.

5.7 PREVISÃO DA PRESSÃO DE VAPOR REID

Uma tentativa de ajuste inicial com as mesmas 66 variáveis de entrada utilizadas na previsão da densidade não foi bem sucedida, pois as mesmas representam toda a faixa de composição da gasolina, ao passo que a pressão de vapor está diretamente ligada à quantidade de compostos leves. Com isto, um refinamento dos dados foi necessário: das 66 variáveis iniciais foram escolhidas 32 que poderiam

representar os compostos leves da gasolina. As 32 variáveis de entrada utilizadas para a rede complexa são:

- Aromáticos: AC6, AC7, AC8 e AC9.
- Iso parafinas: IC5, IC6, IC7, e IC8.
- Naftênicos: NC5, NC6 e NC7.
- Olefinas: OLC4, OLC5, OLC6, OLC7, OLC8 e OLC9.
- Oxigenados: OXC2, OXC3 e OXC4.
- Parafinas: PC3, PC4, PC5, PC6, PC7, PC8 e PC9.
- Desconhecidos: DC5, DC6, DC7, DC8 e DC9.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: **3**

Função de transferência da camada oculta: **purelin**

Função de transferência da camada de saída: **logsig**

Número de iterações: **3 904**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática dos erros dos pontos de treino: **0.000344804**

Média quadrática dos erros dos pontos de teste: **0.00011203**

O refinamento das variáveis de entrada não foi aplicado à rede simples (7 entradas), pois a quantidade de informação é a mínima possível.

Arquitetura da melhor rede (simples):

Número de neurônios da camada oculta: **8**

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **20 000**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.000347189**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.00032879**

Obteve-se um melhor ajuste após aplicar um menor intervalo de normalização. Observa-se ao comparar os gráficos 5.18 e 5.19 que desvios de previsão da rede simples (média de 2,62%) são um pouco maiores que os desvios obtidos pela rede complexa (média de 1,67%). Neste caso, a rede complexa consegue mapear de uma forma mais eficiente as relações existentes entre as variáveis do que a rede simples (gráficos 5.16 e 5.17).

A inserção de ruído experimental relativo às características de volatilidade de cada amostra em particular, pode ser um indicativo da dificuldade de ajuste dos pontos em ambas as redes. A perda de voláteis pode ser bastante efetiva ao manusear uma amostra que possua grande quantidade de compostos voláteis em temperatura ambiente.

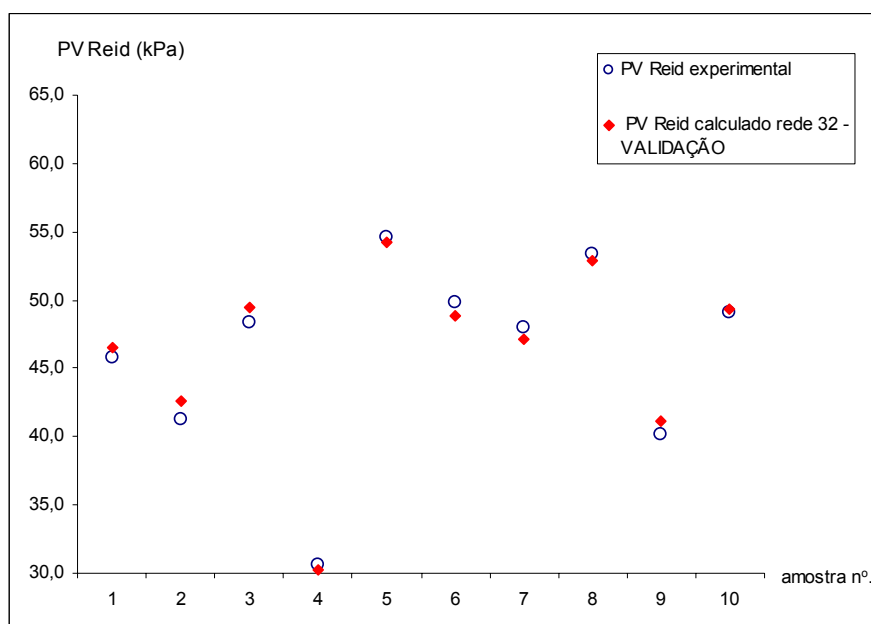


FIGURA 5.16 - PV REID EXPERIMENTAL X PV REID CALCULADA PELA REDE COMPLEXA.

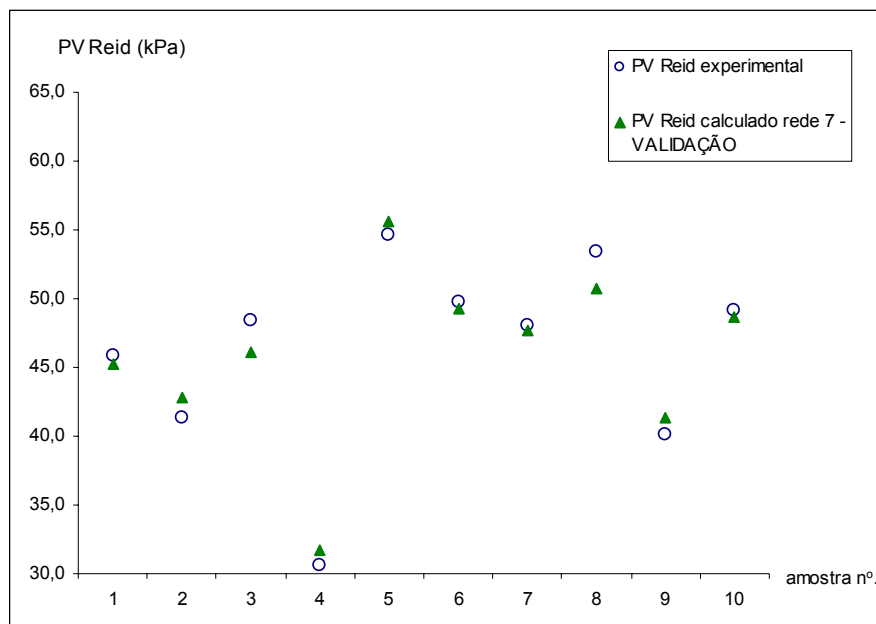


FIGURA 5.17 - PV REID EXPERIMENTAL X PV REID CALCULADA PELA REDE SIMPLES.

A maior dificuldade de ajuste dos pontos pela rede mais simples pode ser explicada pela quantidade de desconhecidos em cada amostra de gasolina. Dentro desta classe estão todos os tipos de desconhecidos e se fossem separados em subclasses de voláteis e pesados, uma importante variável de entrada poderia ser melhor representada para a propriedade em questão.

Para diminuir o valor de desconhecidos nas amostras de gasolina é necessário que um trabalho de identificação por espectrometria de massa atômica seja realizado. Cada pico desconhecido é identificado e classificado. Após a identificação, a biblioteca do DHA (PIANO library) deve ser enriquecida com as novas substâncias e seus respectivos índices de retenção, passando-se por outro processo de comparação com misturas de padrões além de nova inserção de picos de referência para calibração interna do programa DHA.

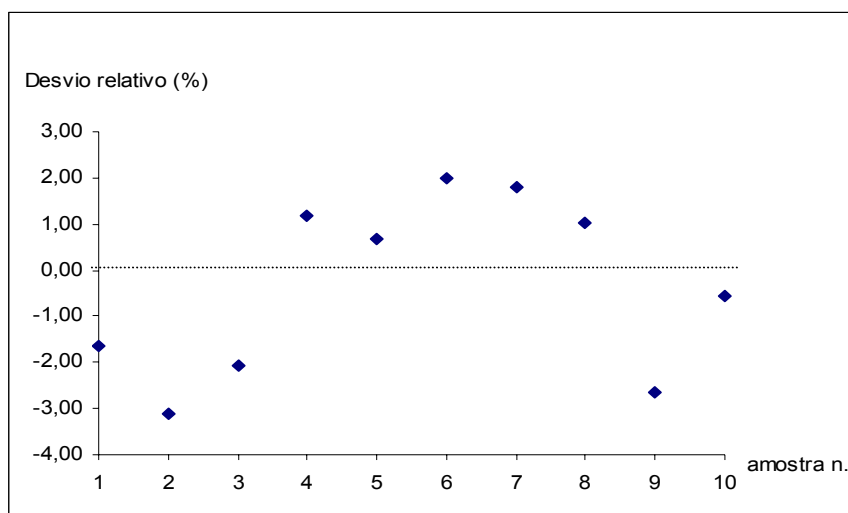


FIGURA 5.18 - DESVIOS DE PREVISÃO DE PV REID PARA REDE COMPLEXA – VALIDAÇÃO.

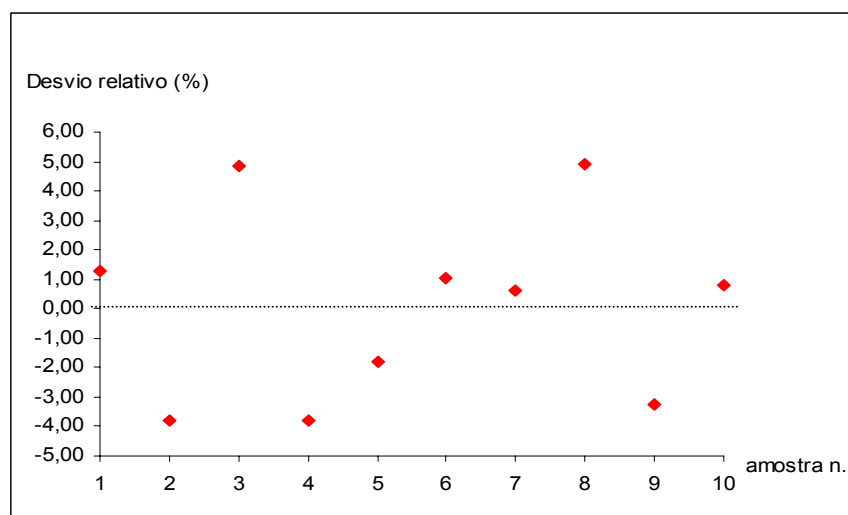


FIGURA 5.19 – DESVIOS DE PREVISÃO DE PV REID PARA REDE SIMPLES – VALIDAÇÃO.

5.8 PREVISÃO DA CURVA DE DESTILAÇÃO ASTM

5.8.1 Ponto Inicial de Ebulição

As variáveis de entrada foram as mesmas utilizadas para previsão de pressão de vapor Reid, já que as características de volatilidade de compostos leves são as maiores influências para ambas as propriedades.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: **6**

Função de transferência da camada oculta: **purelin**

Função de transferência da camada de saída: **logsig**

Número de iterações: **7 257**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.000135629**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000195635**

Arquitetura da melhor rede (simples):

Número de neurônios da camada oculta: **15**

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **10 909**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.000269878**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000167826**

A correlação foi encontrada ao aplicar um menor intervalo de normalização para um melhor ajuste. Comparando-se os gráficos 5.22 e 5.23, nota-se que os desvios da rede complexa e simples estão muito próximos.

As observações a respeito da volatilidade de cada amostra e do teor de desconhecidos descritas anteriormente para a pressão de vapor Reid, também explicam a dificuldade de ajuste dos pontos para o ponto inicial de ebulição. Pode-se acrescentar que o sensor infravermelho de nível deve detectar a primeira gota que cai na proveta coletora, com probabilidade de inserção de erros aleatórios nas leituras de PIE.

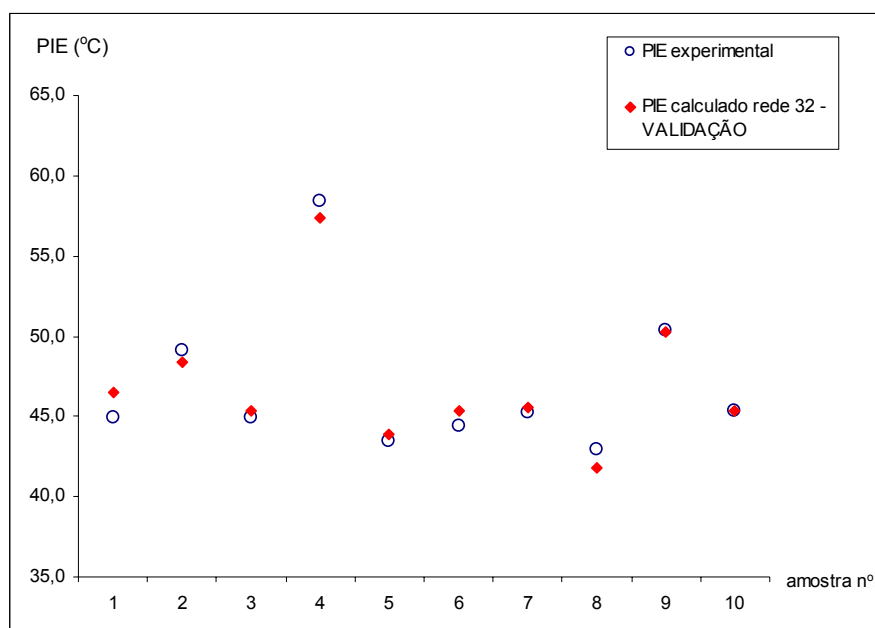


FIGURA 5.20 - PIE EXPERIMENTAL X PIE CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.

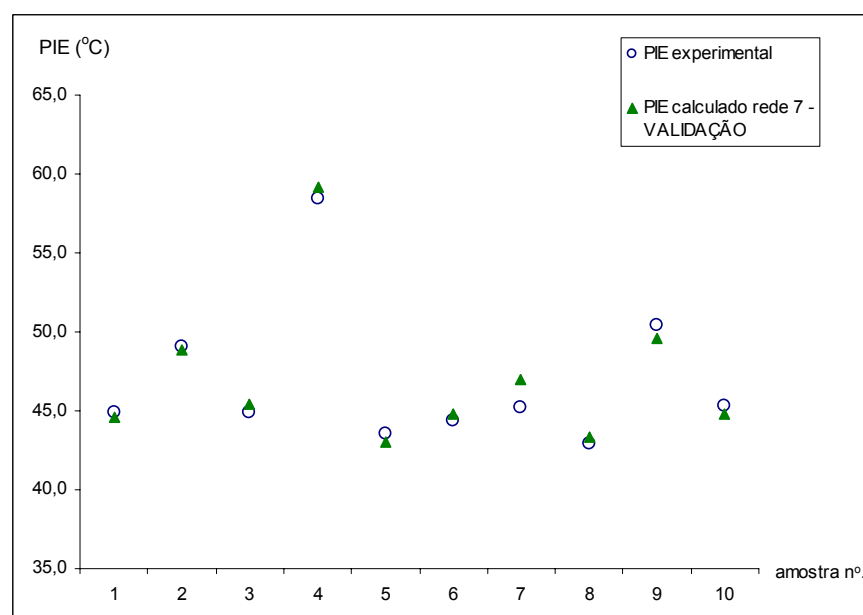


FIGURA 5.21 - PIE EXPERIMENTAL X PIE CALCULADO PELA REDE SIMPLES.

A dificuldade de ajuste dos pontos, forçando a uma diminuição do intervalo de normalização, não impediu que a correlação fosse encontrada e com desvios mínimos. Os desvios médios de 1,43% existentes para a rede complexa e 1,33% para a rede simples demonstram que é possível a previsão do ponto inicial de ebulição

próximos dos valores experimentais, já que o equipamento apresenta uma repetitividade de 1,26%.

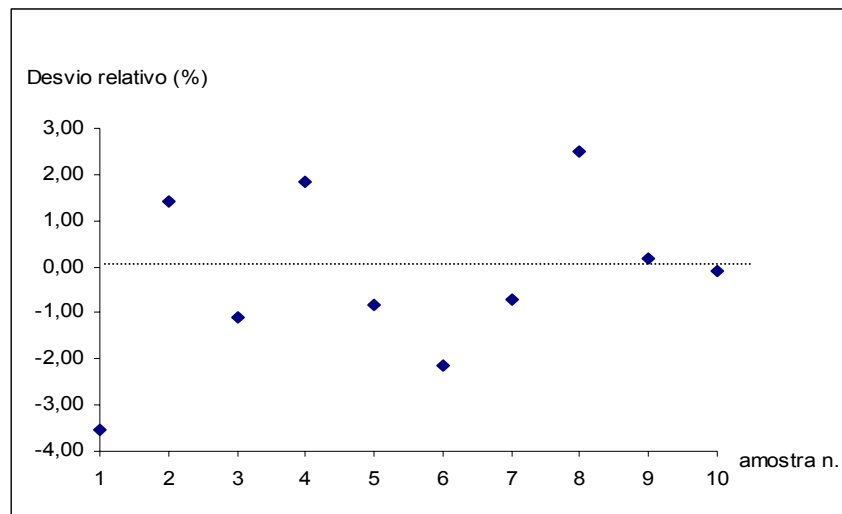


FIGURA 5.22 - DESVIOS DE PREVISÃO DE PIE PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.

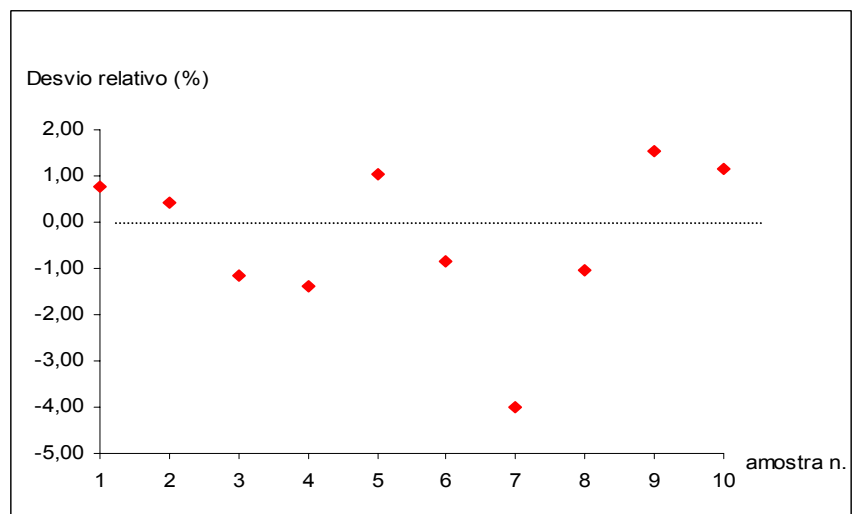


FIGURA 5.23 – DESVIOS DE PREVISÃO DE PIE PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.

5.8.2 Curva de Destilação (T_{10})

Tentou-se inicialmente correlacionar as mesmas 66 variáveis de entrada utilizadas para a densidade. Como os desvios obtidos foram satisfatórios, não se tentou reduzir a quantidade de variáveis de entrada, mesmo que ainda representem toda a faixa composicional da gasolina.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: **8**

Função de transferência da camada oculta: **purelin**

Função de transferência da camada de saída: **purelin**

Número de iterações: **1 347**

Intervalo de normalização: **0.2 – 0.8**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.00178344**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000450307**

Arquitetura da melhor rede (simples):

Número de neurônios da camada oculta: **11**

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **2 723**

Intervalo de normalização: **0.2 – 0.8**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.000465193**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000377225**

O ajuste dos dados foi realizado com sucesso. Os desvios médios obtidos na validação para a rede complexa e simples (0,97% e 0,86%) estão próximos da incerteza de medição do equipamento (0,55%). Isto quer dizer que a previsão do T_{10} pode ser realizada utilizando-se ambas as arquiteturas de rede e seus valores estão muito próximos do erro experimental. Observa-se também que a rede simples possui capacidade preditiva igual à complexa (figuras 5.26 e 5.27).

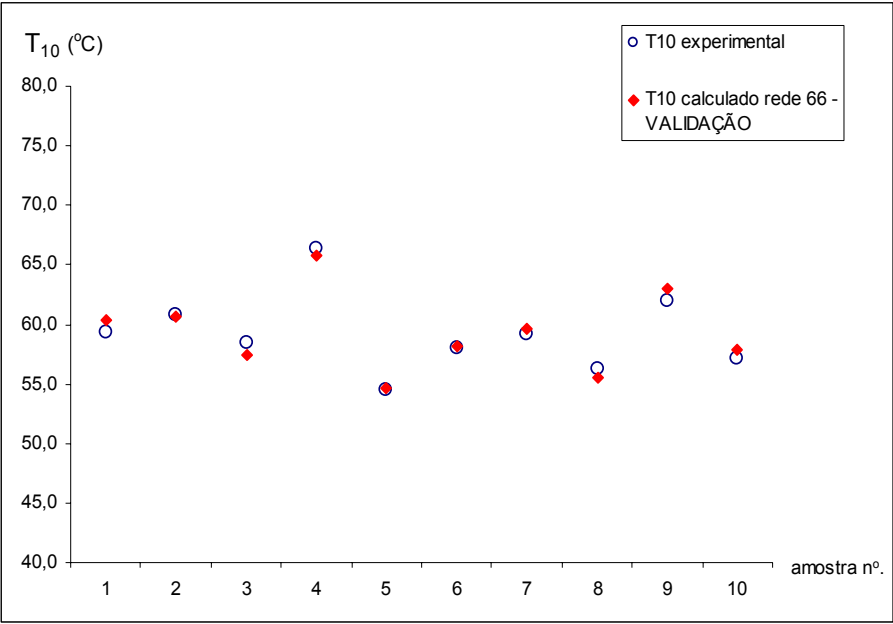


FIGURA 5.24 - T_{10} EXPERIMENTAL X T_{10} CALCULADA PELA REDE COMPLEXA.

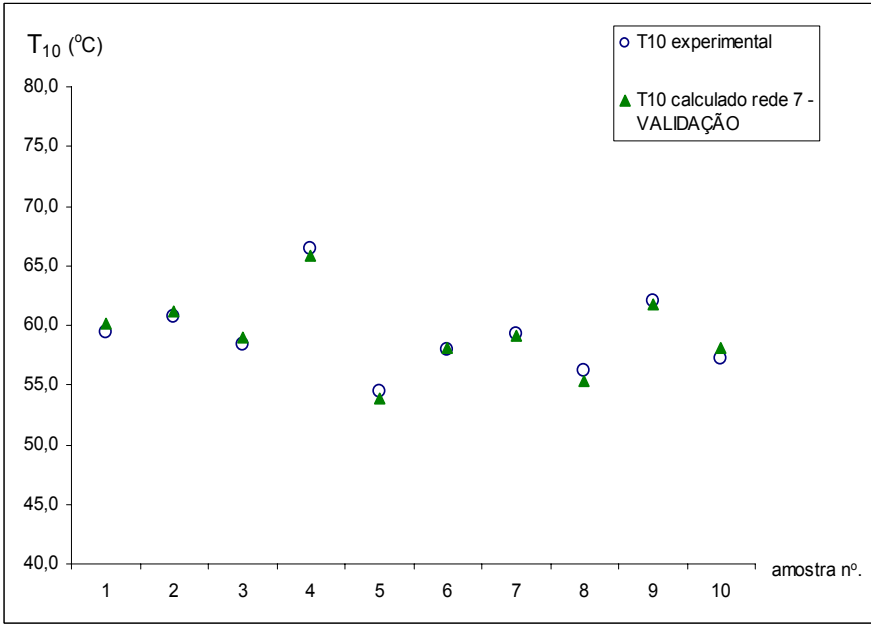


FIGURA 5.25 - T_{10} EXPERIMENTAL X T_{10} CALCULADA PELA REDE SIMPLES.

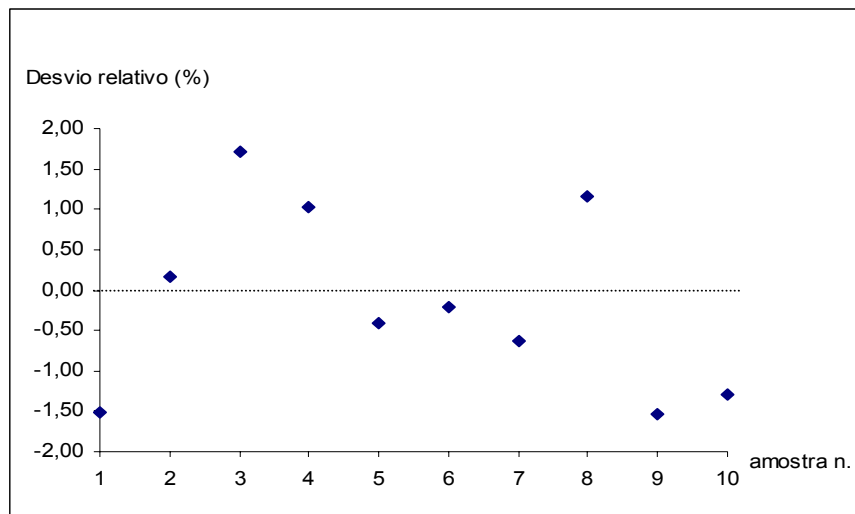


FIGURA 5.26 - DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{10} PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.

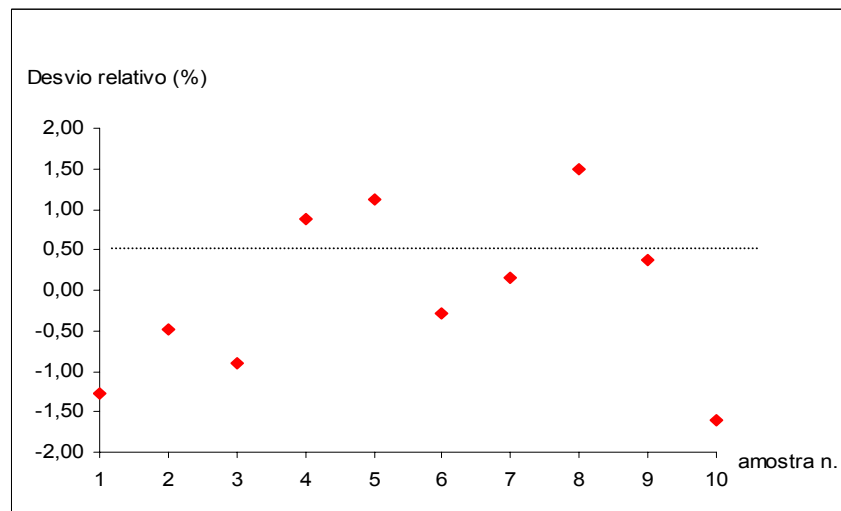


FIGURA 5.27 – DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{10} PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.

5.8.3 Curva de Destilação (T_{50})

Utilizou-se as mesmas 66 variáveis de entrada aplicadas para a previsão da densidade e T_{10} , pois em 50% de destilado a quantidade de componentes químicos torna-se grande e a representatividade de toda faixa composicional torna-se interessante.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: **4**

Função de transferência da camada oculta: **purelin**

Função de transferência da camada de saída: **purelin**

Número de iterações: **7 362**

Intervalo de normalização: **0.2 – 0.8**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.00007691**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.00037375**

Arquitetura da melhor rede (simples):

Número de neurônios da camada oculta: **12**

Função de transferência da camada oculta: **logsig**

Função de transferência da camada de saída: **purelin**

Número de iterações: **11 952**

Intervalo de normalização: **0.2 – 0.8**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.00051762**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000252995**

O ajuste dos dados foi realizado facilmente. Observa-se nos gráficos 5.30 e 5.31 que os valores dos desvios obtidos para ambas as redes estão muito próximos, não existindo capacidade preditiva diferenciada entre as mesmas. Os desvios médios obtidos na validação para a rede complexa e simples (0,43% e 0,32%) estão próximos da incerteza de medição do equipamento (0,55%). Portanto, a previsão do T_{50} pode ser realizada utilizando-se ambas as arquiteturas de rede com seus valores muito próximos do erro experimental.

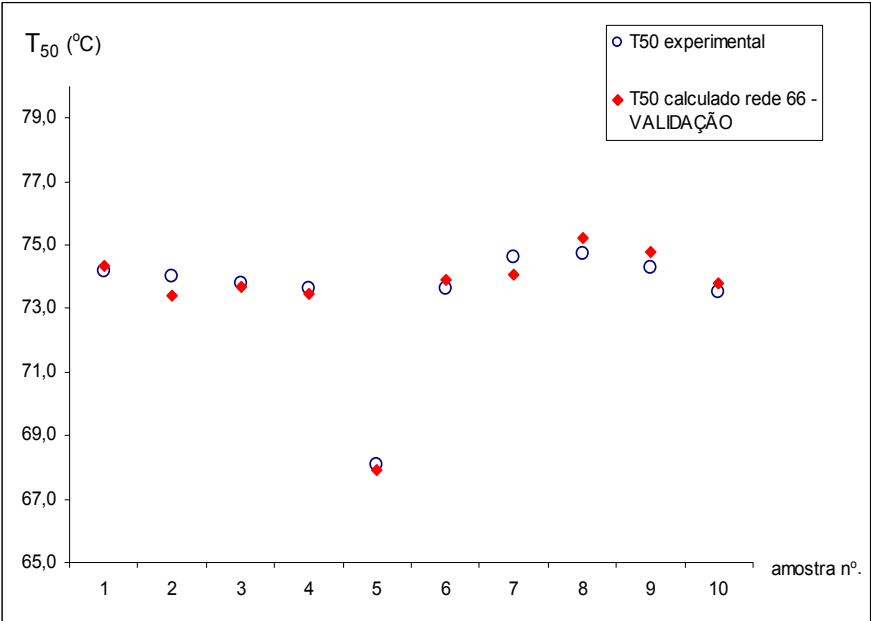


FIGURA 5.28 - T₅₀ EXPERIMENTAL X T₅₀ CALCULADA PELA REDE COMPLEXA.

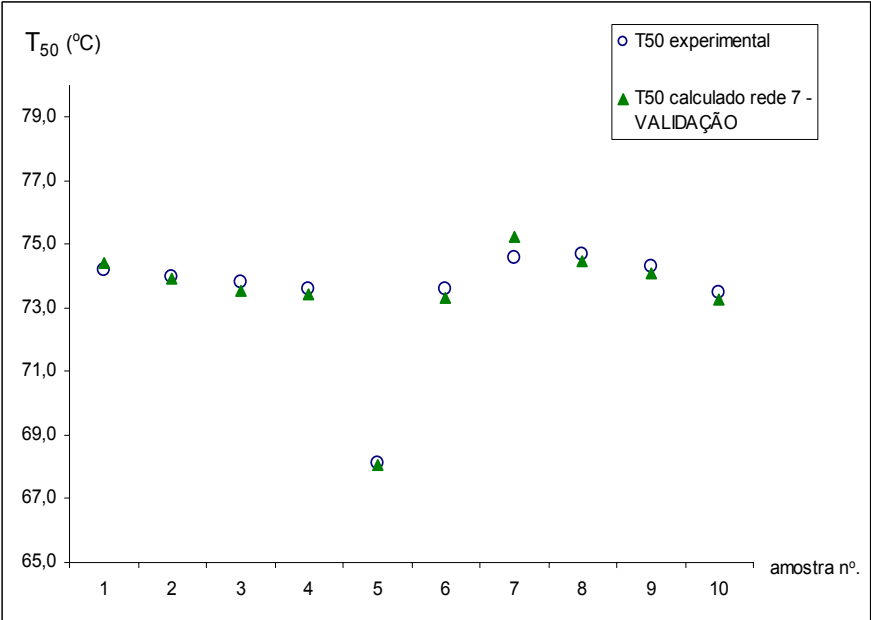


FIGURA 5.29 - T₅₀ EXPERIMENTAL X T₅₀ CALCULADA PELA REDE SIMPLES.

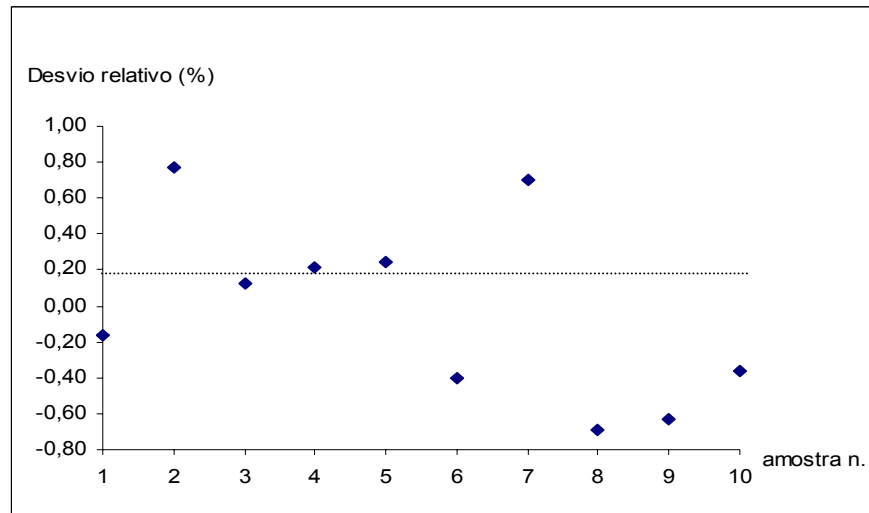


FIGURA 5.30 - DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{50} PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.

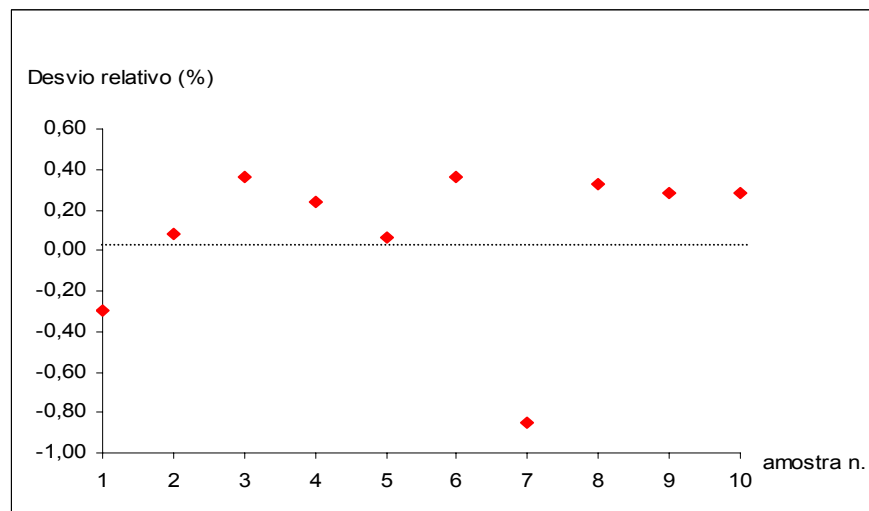


FIGURA 5.31 – DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{50} PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.

5.8.4 Curva de Destilação(T₉₀)

Um refinamento das variáveis de entrada foi necessário assim como nos casos da PV Reid e PIE. O T₉₀ está relacionado com os compostos pesados da gasolina e 35 variáveis de entrada que representam esta parte foram selecionadas. A quantidade de etanol também foi considerada neste caso, devido a grande quantidade existente, o que influencia também nesta propriedade. As variáveis selecionadas são:

- Aromáticos: AC10, AC11, AC12, AC13, AC14 e AC15.
- C14+: C14 e C15.
- Iso parafinas: IC9, IC10, IC11 e IC12.
- Naftênicos: NC8, NC9, NC10 e NC12.
- Olefinas: OLC10, LC11, OLC12, OLC13, OLC14, OLC15 e OLC16.
- Oxigenados: OXC2.
- Parafinas: PC10, PC11, PC12, PC13, PC14, PC15 e PC16.
- Desconhecidos: DC10, DC11, DC12 e DC13.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: **5**

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **9 753**

Intervalo de normalização: **0.2 – 0.8**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.000164546**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.00031234**

Arquitetura da melhor rede (simples):

Número de neurônios da camada oculta: **9**

Função de transferência da camada oculta: **logsig**

Função de transferência da camada de saída: **logsig**

Número de iterações: **11 943**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.000649015**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000113974**

Os desvios de previsão com média de 1,72% para ambas as redes estão mais altos do que o esperado, pois a repetitividade do equipamento insere um erro de apenas 0,32%. O ajuste para as outras temperaturas, principalmente T_{10} e T_{50} da curva de destilação foi efetuado facilmente e com desvios menores.

Variações na taxa de destilação em função da característica da amostra pode ser um fonte de erros aleatórios. Dependendo da quantidade de leves ou pesados, a taxa de destilação não fica mais entre 4 e 5 ml/min., podendo variar de 1 a 9 ml/min. Também é possível que ocorra o craqueamento das moléculas, pois a temperatura atinge patamares altos.

Embora com média de desvios iguais, observa-se uma pequena diferença no ajuste entre a rede complexa e a simples. Ao reduzir a quantidade de informação de entrada, a rede simples acaba necessitando de um menor intervalo de normalização [0,3-0,7] para que o melhor ajuste ocorra. A quantidade de desconhecidos pode atrapalhar este ajuste, ocultando uma porcentagem de pesados que poderia ser uma informação importante para o T_{90} .

De qualquer forma, os desvios obtidos para ambas as redes foram pequenos. Com isto, ambas as redes obtidas podem ser utilizadas para previsão do T_{90} , com previsão de pontos próximos ao experimental.

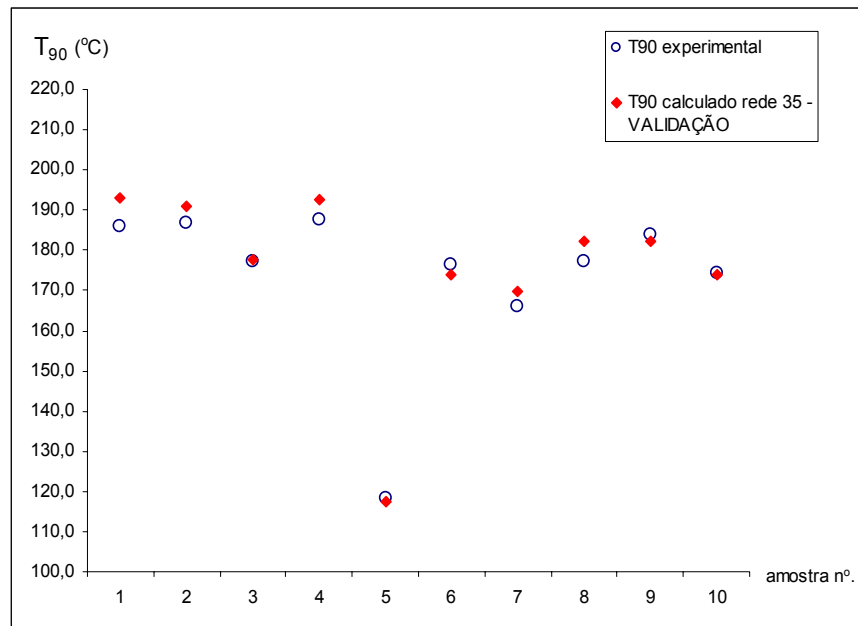


FIGURA 5.32 - T₉₀ EXPERIMENTAL X T₉₀ CALCULADA PELA REDE COMPLEXA.

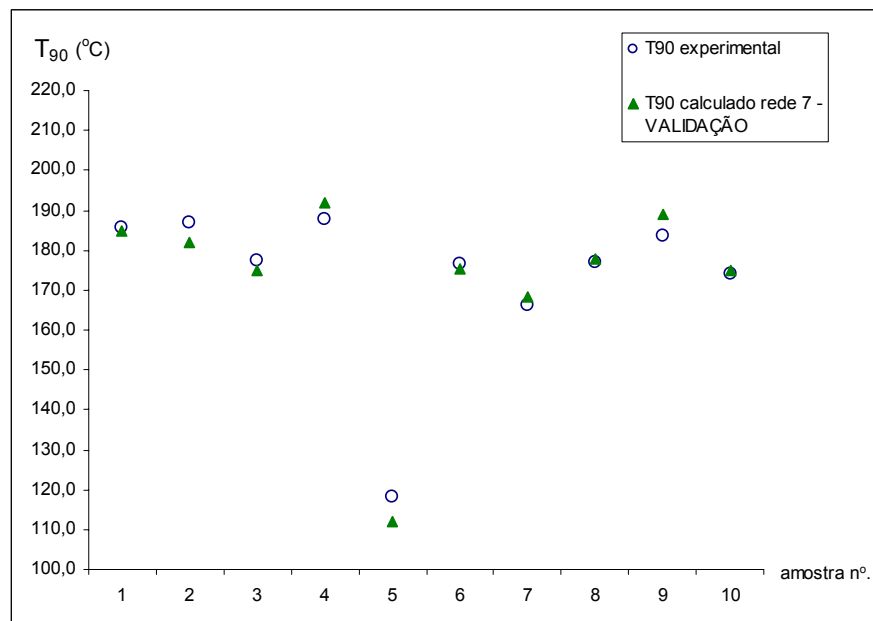


FIGURA 5.33 - T₉₀ EXPERIMENTAL X T₉₀ CALCULADA PELA REDE SIMPLES.

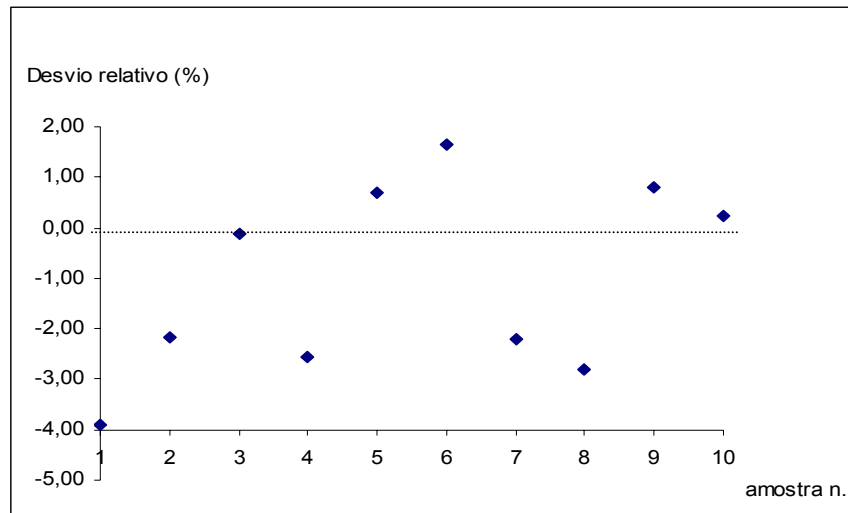


FIGURA 5.34 - DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{90} PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.

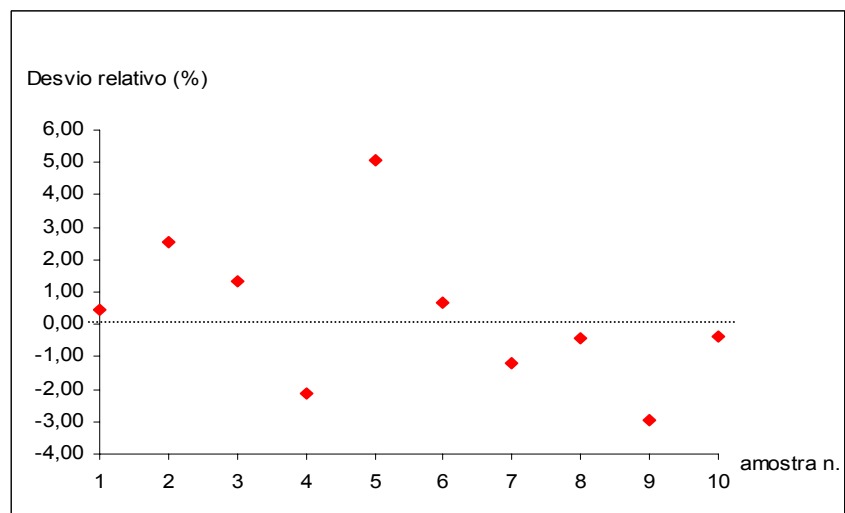


FIGURA 5.35 – DESVIOS DE PREVISÃO DE T_{90} PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.

5.8.5 Ponto Final de Ebulição

Ao escolher as mesmas 35 variáveis de entrada usadas para treinar a rede para o T_{90} , o ajuste de dados não seguiu a mesma linha observada para as propriedades anteriores. Então um novo refinamento desses dados foi realizado chegando até 24 variáveis de entrada, representando a parte mais pesada da gasolina:

- Aromáticos: AC12, AC13, AC14 e AC15.
- C14+: C14 e C15.
- Iso parafinas: IC10, IC11 e IC12.
- Naftênicos: NC10 e NC12.
- Olefinas: OLC12, OLC13, OLC14, OLC15 e OLC16.
- Parafinas: PC12, PC13, PC14, PC15 e PC16.
- Desconhecidos: DC11, DC12 e DC13.

Arquitetura da melhor rede (complexa):

Número de neurônios da camada oculta: **3**

Função de transferência da camada oculta: **pureline**

Função de transferência da camada de saída: **tansig**

Número de iterações: **4 581**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.00137131**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.00066504**

Arquitetura da melhor rede(simples):

Número de neurônios da camada oculta: **8**

Função de transferência da camada oculta: **tansig**

Função de transferência da camada de saída: **pureline**

Número de iterações: **3 011**

Intervalo de normalização: **0.3 – 0.7**

Média quadrática do erros dos pontos de treino: **0.0024024**

Média quadrática do erros dos pontos de teste: **0.000679695**

O melhor ajuste dos dados foi obtido ao utilizar-se o intervalo de normalização de [0,3-0,7] para ambas as redes. Os desvios médios de 2,16% da rede complexa e 1,70% da rede simples aproximam-se do erro de repetitividade que é de 1,07%. Observa-se que a rede simples possui uma capacidade preditiva um pouco melhor que a complexa (figuras 5.38 e 5.39), porém tanto a rede mais complexa quanto a mais simples poderão ser utilizadas para prever o ponto final de ebulição.

Para o PFE, o resultado é considerado bom, devido à existência de alterações características do final da destilação. Neste ponto, pode ocorrer pirólise ou craqueamento de uma molécula, produzindo moléculas menores com ponto de ebulição mais baixos que a molécula original. A leitura deste ponto é suscetível à variações devido ao sensor de ponto seco, que mede o ponto seco e é aproximado para o ponto final de ebulição.

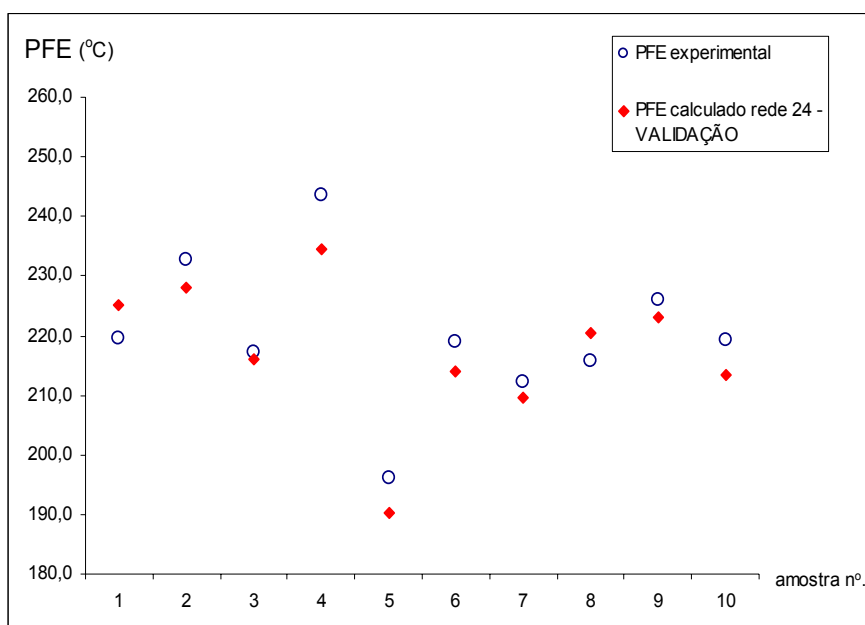


FIGURA 5.36 - PFE EXPERIMENTAL X PFE CALCULADO PELA REDE COMPLEXA.

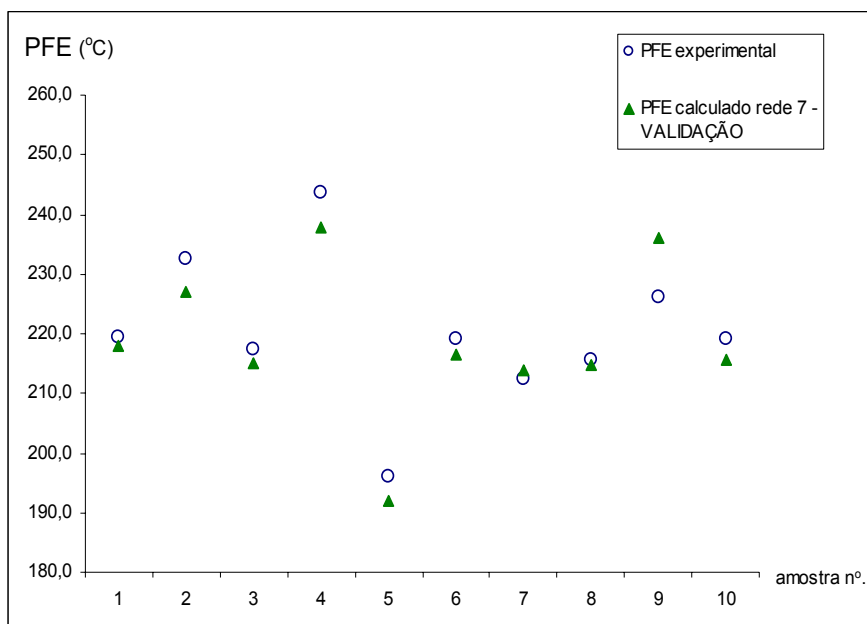


FIGURA 5.37 - PFE EXPERIMENTAL X PFE CALCULADO PELA REDE SIMPLES.

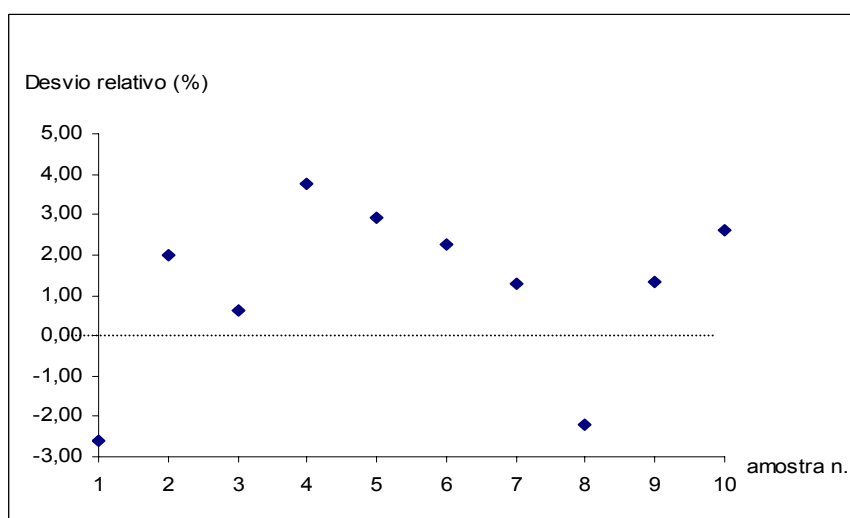


FIGURA 5.38 - DESVIOS DE PREVISÃO DE PFE PARA REDE COMPLEXA - VALIDAÇÃO.

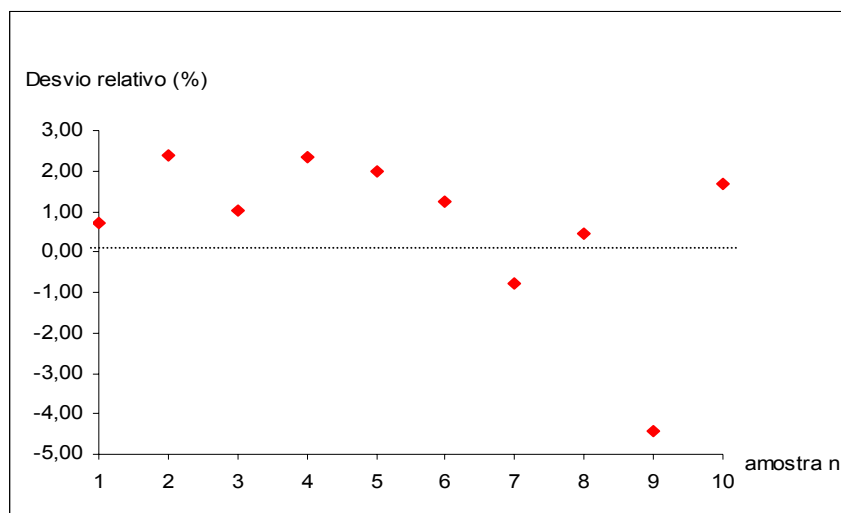


FIGURA 5.39 – DESVIOS DE PREVISÃO DE PFE PARA REDE SIMPLES - VALIDAÇÃO.

A tabela 5.19 resume os resultados obtidos para cada rede e a comparação com o erro inserido por cada equipamento, no conjunto de validação. Os desvios médios e máximos fornecem um indicativo da capacidade preditiva de cada rede. Observa-se que, de um modo geral as redes obtidas podem ser utilizadas para a previsão das propriedades estudadas, pois os desvios médios estão próximos do erro experimental. Os pontos calculados pelas redes sempre acompanham a tendência de variação dos pontos experimentais.

Ao reduzir-se as variáveis de entrada os desvios médios das redes simples ficaram iguais ou melhores que as complexas. Isto se deve ao fato de que a sensibilidade de cada variável de entrada modifica-se durante esta redução. Na rede complexa, uma variável de entrada com grande sensibilidade torna-se menos sensível ao ser aglomerada na rede simples. Com isto, pequenas variações na composição químicas da gasolina não influenciam tanto na rede simples obtendo-se, portanto, uma rede mais robusta, onde uma informação de composição química média é o suficiente para ser utilizada como um conjunto de variáveis de entrada.

O tempo de análise utilizado para determinar a composição química da gasolina via cromatografia gasosa é mais longo (140 minutos) do que os ensaios físico-químicos aqui apresentados (70 minutos). Porém para a determinação de MON e RON (240 minutos cada) esta ferramenta analítica torna-se atrativa. Mesmo assim é

interessante que o tempo de análise seja diminuído aplicando-se novas tecnologias ou utilizando-se outra ferramenta analítica mais rápida. Como exemplo pode-se aplicar espectrometria no IV ou UV (5 minutos de análise) para obtenção da composição química da gasolina. Otimizando-se o tempo de análise para obtenção da composição química média da gasolina, as redes obtidas podem ser aplicadas para um rápido monitoramento da gasolina nacional, porém restringe-se aos limites de legislação. Caso um valor reportado esteja fora destes limites é necessário que seja verificado pelo ensaio padrão ASTM ou NBR. O custo de implantação de um cromatógrafo gasoso também é maior do que os outros equipamentos comparados neste trabalho, porém ao comparar com os custos de implantação e manutenção de um motor CFR (utilizado para determinar o MON ou RON), a aplicação de redes neuronais para previsão destas propriedades torna-se atrativa.

Comparando-se com a destilação da gasolina, que gera 100 ml de resíduo ambiental e emissões tóxicas, a cromatografia gasosa quase não gera resíduo, sendo uma boa opção levando-se em conta questões ambientais.

TABELA 5.19 – RESUMO DOS DESVIOS DE PREVISÃO PARA O CONJUNTO DE VALIDAÇÃO DAS REDES NEURONAIS PARA CADA PROPRIEDADE ESTUDADA.

PROPRIEDADE	VAR. DE ENTRADA	DESVIO MÁXIMO - TESTE (%)	DESVIO MÉDIO - TESTE (%)	REPETITIVIDADE DO EQUIPAMENTO (%)
Densidade a 20 °C	66	0,33	0,13	0,015
	7	0,23	0,11	
PV Reid	32	3,11	1,67	0,11
	7	4,94	2,62	
PIE	32	3,53	1,43	1,26
	7	4,01	1,33	
T10	66	1,71	0,97	0,55
	7	1,48	0,86	
T50	66	0,77	0,43	0,21
	7	0,85	0,32	
T90	35	3,92	1,72	0,32
	7	6,37	1,81	
PFE	24	3,75	2,16	1,07
	7	4,41	1,70	

6 CONCLUSÃO

Foi possível obter correlações ajustadas à gasolina brasileira aplicando-se o método matemático de redes neurais do tipo “feedforward” com algoritmo “backpropagation”. Das 14 500 redes treinadas, as escolhidas conseguiram mapear com precisão o conjunto de dados experimentais gerados para este trabalho.

A redução da dimensionalidade das redes mostrou-se significativa, pois a capacidade preditiva das redes mais simples estão iguais ou melhores que as redes complexas. Isso comprova que um excesso de informação não pertinente na fase de treinamento de uma rede pode deteriorar a sua capacidade preditiva devido ao excesso de parâmetros a serem ajustados. Conseguiu-se determinar um conjunto reduzido de variáveis de entrada, contendo uma informação média sobre a composição química da gasolina, capaz de prever as propriedades estudadas com precisão, mesmo com 8% de compostos desconhecidos.

De uma forma geral, as redes neurais obtidas podem ser utilizadas para a previsão de propriedades da gasolina, tais como a densidade relativa a 20°C, pressão de vapor Reid e curva de destilação (PIE, T_{10} , T_{50} , T_{90} e PFE). A partir de sua composição química obtida por cromatografia gasosa com detector de ionização de chama usada como entrada de variáveis, cada rede neuronal pode prever sua respectiva propriedade, dentro da precisão experimental. Este trabalho pode vir a ser um exemplo de uma nova aplicação de análise confiável para monitorar a gasolina brasileira e reduzir custos laboratoriais.

7 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como a amostragem estratificada foi aplicada a um período de 2 meses, pode ser necessário um aprofundamento do estudo para inserção de pontos fora do intervalo estudado, com o objetivo de adequar as redes obtidas para aplicação prática (inferência). Coletando-se amostras de todo o território nacional, permitiria avaliar a aplicabilidade das redes obtidas, ou montar novas redes neuronais a partir da composição química simplificada em nível nacional ou regional.

A obtenção de correlações para o MON e RON é possível aplicando-se a mesma linha de estudo. Pode-se testar outros métodos de identificação química tais como espectrometria por ultravioleta e infravermelho. O tipo de rede neuronal para este caso deve ser estudado.

Sugere-se também o enriquecimento da biblioteca do programa DHA para diminuição dos valores de desconhecidos. Torna-se necessário um mapeamento da composição química da gasolina por espectrometria de massa atômica.

A aplicação prática deste estudo pode estender-se ao controle da nafta na refinaria, desde que utilizados os métodos de identificação de composição química adequados para tal finalidade.

REFERÊNCIAS

ANDRADE, J. M.; MUNIATEGUI, S.; PRADA, D. 1997, Prediction of Clean Octane Numbers of Catalytic Reformed Naphthas using FT-m.i.r. and PLS. **Fuel**, v. 76, n. 11, p. 1035-1042, 1997.

ANDRADE, J. M.; SÁNCHEZ, M.S.; SARABIA, L. A.. Applicability of High-absorbance MIR Spectroscopy in Industrial Quality Control of Reformed Gasolines. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 46, p. 41-55, 1999.

ARRIAGADA, J.; OLAUSSON P.; SELIMOVIC, A.. Artificial Neural Network Simulator for SOFC Performance Prediction. **Journal of Power Sources**, v. 112, p. 54 – 60, 2002.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS – ABNT. **NBR 9619**: Produtos de Petróleo – Determinação das Propriedades de Destilação. Rio de Janeiro, 1998.

BASU, B. et al. Prediction of Biodegradability of Mineral Base Oils from Chemical Composition using Artificial Neural Networks. **Tribology International**, v. 31, n.4, p. 159 -168, 1998.

BEENS, J.; BRINKMAN, U. A. T.. The Role of Gas Chromatography in Compositional Analyses in the Petroleum Industry. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 19, n. 4, p. 260-275, 2000.

CHOW, T.T. et al. Global Optimization of Absorption Chiller System by Genetic Algorithm and Neural Network. **Energy and Buildings**, v. 34, p. 103 -109, 2002.

CIOLA, R. **Introdução à Cromatografia em Fase Gasosa**. São Paulo: Ed. Edgard Blücher Ltda., 1973.

DMA 4500 / 5000 – Instruction Handbook, Viena: ANTOON PAAR GmbH. Versão 4.510d, 2001.

EGHBALDAR, A.; FORREST, T. P.; CABROL-BASS, D.. Development of Neural Networks for Identification of Structural Features from Mass Spectral Data. **Analytica Chimica Acta**, v. 359, p. 283 - 301, 1998.

ELSHARKWY, A. M.; GHARBI, R. B. C.. Comparing Classical and Neural Regression Techniques in Modeling Crude Oil Viscosity. **Advances in Engineering Software**, v. 32, p. 215 – 224, 2001.

GARCÍA-MENCIA, M.V. et al. An Empirical Approach to Update Multivariate Regression Models Intended for Routine Industrial Use. **Fuel**, v. 79, p. 1823 -1832, 2000.

GEMPERLINE, P. J.. Developments in Nonlinear Multivariate Calibration. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 15, p. 115 - 126, 1992.

HAYKIN, S. **Neural Networks – A Comprehensive Foundation**. 2. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1999.

HERZOG GmbH, W. **Manual for the Automatic Distillation System**. Lauda-Königshofen: Fabrik für Laboratoriums apparate. Versão 3.0 A, 2000.

INSTITUTO NACIONAL DE METROLOGIA, NORMALIZAÇÃO E QUALIDADE INDUSTRIAL – INMETRO. **Vocabulário Internacional de Metrologia**. Rio de Janeiro, 1995.

IOB, A. et al.. Prediction of Reformatted Research Octane Number by FT-IR. Spectroscopy. **Fuel**, v. 74, n. 2, p. 227-231, 1995.

IOB, A.; BUENAFE, R.; ABBAS, N.M. Determination of Oxygenates in Gasoline by FTIR, **Fuel**, v. 77, n. 15, p. 1861-1864, 1998.

JALALI-HERAVI, M.; FATEMI, M. H.. Prediction of Thermal Conductivity Detection Response Factors using an Artificial Neural Network. **Journal of Chromatography A**, v. 897, p. 227 - 235, 2000.

JALALI-HERAVI, M.; GARKANI-NEJAD, Z.. Use of Self-training Artificial Neural Networks in Modeling of Gas Chromatographic Relative Retention Times of a Variety of Organic Compounds. **Journal of Chromatography A**, v. 945, p. 173 - 184, 2002.

KAPUR, G.S.; SINGH, A.P.; SARPAL, A.S.. Determination of Aromatics and Naphthenes in Straight Run Gasoline by ¹H NMR Spectroscopy. **Fuel**, v. 79, p. 1023 - 1029, 2000.

KATEMAN, G.; SMITS, J.R.M.. Colored Information from a Black Box? **Analytica Chimica Acta**, v. 277, p. 179-188, 1993.

KAWAKAMI, A.; SHIKADA, A.; MIYAO, K.. Control Method for Brake Vapor Lock in Automobiles. **JSAE Review**, v. 21, p. 73- 78, 2000.

KORRES, D.M. et al.. A Neural Network Approach to the Prediction of Diesel Fuel Lubricity. **Fuel**, v. 81, p. 1243- 1250, 2002.

LAVINE, B.K. et al.. Genetic Algorithm for Fuel Spill Identification. **Analytica Chimica Acta**, v. 437, p. 233 - 246, 2001.

LITANI-BARZILAI, I. et al.. On-line Remote Prediction of Gasoline Properties by Combined Optical Methods. **Analytica Chimica Acta**, v. 339, p. 193-199, 1997.

MAVROVOUNIOTIS, M. L.; CHANG, S.. Hierarchical Neural Networks. **Computers Chem. Engineering**, v. 16, p. 347-369, 1992.

MELSEN, W. J. et al.. Using Artificial Neural Networks for Solving Chemical Problems – Part II. Kohonen Self-organizing Feature Maps. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 23, p. 267-291, 1994.

MENDENHALL, W. **Probabilidade e Estatística**. Rio de Janeiro: Ed. Campus, 1985. 325 p.

MEUSINGER, R.; MOROS, R.. Determination of Quantitative Structure-Octane Rating Relationships of Hydrocarbons by Genetic Algorithms. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 46, p. 67 - 78, 1999a.

MEUSINGER, R. Qualitative and Quantitative Determination of Oxygenates in Gasoline using ^1H Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy. **Analytica Chimica Acta**, v. 391, p. 277-288, 1999b.

MEUSINGER, R.; MOROS, R.. Determination of Octane Numbers of Gasoline Compounds from their Chemical Structure by ^{13}C NMR Spectroscopy and Neural Networks. **Fuel**, v. 80, p. 613 - 621, 2001.

MINIVAP VPS - Operation Manual. Viena: Grabner Instruments. Versão 1.22, 2001.

MITTERMAYR, C.R. et al.. Neural Networks for Library Search of Ultraviolet Spectra. **Analytica Chimica Acta**, v. 294, p. 227 - 242, 1994.

RAGUNATHAN, N. et al.. Gas Chromatography with Spectroscopic Detectors. **Journal of Chromatography A**, v. 856, p. 349-397, 1999.

SARPAL, A. S.; KAPUR, G. S.; SINGH, A. P.. Determination of Aromatics and Naphthenes in Straight Run Gasoline by ^1H NMR Spectroscopy - Part I. **Fuel**, v. 79, p. 1023 - 1029, 2000.

SARPAL, A. S. et al.. PONA Analyses of Cracked Gasoline by ^1H NMR Spectroscopy - Part II. **Fuel**, v. 80, p. 521 - 528, 2001.

SCHOENMAKERS, P. J. et al.. Comparison of Comprehensive Two-dimensional Gas Chromatography and Gas Chromatography – Mass Spectrometry for the Characterization of Complex Hydrocarbon Mixtures. **Journal of Chromatography A**, v. 892, p. 29-46, 2000.

SILVERSTEIN, R. M.; BASSLER, G. C.; MORRILL, T. C.. **Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos**. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan S.A., 1994.

SMITS, J.R.M. et al. Using Artificial Neural Networks for Solving Chemical Problems. Part I. Multi-layer Feed-forward Networks. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 22, p. 165 -189, 1994.

SMITS, J.R.M. et al. Using Molecular Representations in Combination with Neural Networks. A Case Study: Prediction of the HPLC Retention Index. **Computers Chem.**, v. 18 , n. 2, p. 157 – 172, 1994.

SMITS, J.R.M. et al.. Interpretation of Infrared Spectra with Modular Neural Network Systems.. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 18, p. 27 - 39, 1993.

SONG, X. et al. Source Apportionment of Gasoline and Diesel by Multivariate Calibration based on Single Particle Mass Spectral Data. **Analytica Chimica Acta**, v. 446, p. 329 -343, 2001.

TOLEDO, G. L.; OVALLE, I. I.. **Estatística Básica**. São Paulo: Atlas S.A., 1995.

VAN LEEUWEN, J. A.; JONKER, R. J.; GILL, R.. Octane Number Prediction Based on Gas Chromatographic Analysis with Non-linear Regression Techniques. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 25, p. 325-340, 1994.

WIENKE, D.; KATEMAN, G.. Adaptive Resonance Theory based Artificial Neural Networks for Treatment of Open-category Problems in Chemical Pattern Recognition – Application to UV-Vis and IR Spectroscopy. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 23, p. 309 - 329, 1994.

WYTHOFF, B. J.. Backpropagation Neural Networks – A Tutorial. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 18, p. 115 -155, 1993.

YAFFE, D., COHEN, Y.. Neural Network Based Temperature-Dependent Quantitative Structure Property Relations (QSPRs) for Predicting Vapor Pressure of Hydrocarbons. **Journal of Chemical Information and Computation Science**, v. 41, p. 463-477, 2001.

YAMAMOTO, C.I. **Modelagem matemática e otimização do processo de síntese de amônia utilizando redes neurais**. São Paulo, 1998. 209 f. Tese (Doutorado em Engenharia) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

YANG, H. et al.. Neural Network Prediction of Cetane Number and Density of Diesel Fuel from its Chemical Composition Determined by LC and GC-MS. **Fuel**, v. 81, p. 65-74, 2002.

ZHOU, M.; GAUTHIER, J.E.D. A New Method for Adiabatic Flame Temperature Estimations of Hydrocarbon Fuels. **Fuel**, p. 471-478, 1999.

ZHU, X. et al. The Classification of Hydrocarbons with Factor Analysis and the PONA Analysis of Gasoline. **Chemometrics and Intellingent Laboratory Systems**, v.45, p. 147-155, 1999.

ZUPAN, J.; GASTEIGER, J.. Neural Networks: A new Method for Solving Chemical Problems or just a Passing Phase?. **Analytica Chimica Acta**, v. 248, p. 1- 30, 1991.

APÊNDICE 1 – BASE DE DADOS UTILIZADOS PARA ENTRADA E SAÍDA DA REDE NEURONAL POR RETROPROPAGAÇÃO.

TABELA 1.1 - DADOS DE ENTRADA PARA REDE NEURONAL COM 7 VARIÁVEIS – TREINAMENTO E TESTE.

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA GERAL (% v/v)							
	Aromáticos	C14+	Iso-parafinas	Naftênicos	Olefinas	Oxigenados	Parafinas	Desconhecidos
Treino								
1	13,718	0,186	11,551	8,559	16,269	23,023	13,832	12,862
2	15,888	0,763	19,515	6,991	10,184	23,331	11,525	11,802
3	14,807	0,000	15,639	13,507	13,896	21,469	10,948	9,734
4	13,186	0,242	13,417	15,623	10,121	23,243	12,884	11,283
5	13,731	0,149	15,461	18,097	8,935	22,466	11,442	9,719
6	13,463	0,089	15,633	20,868	7,461	22,346	11,100	9,039
7	13,195	0,030	15,805	23,639	5,988	22,226	10,758	8,358
8	11,711	0,288	13,000	11,046	11,952	36,055	8,577	7,371
9	13,917	0,000	16,499	13,707	14,324	20,926	11,911	8,716
10	14,066	0,000	16,132	13,409	14,656	21,970	11,331	8,437
11	12,854	0,265	15,520	13,948	7,330	23,813	16,003	10,266
12	13,183	0,647	19,635	9,670	8,248	22,955	14,462	11,200
13	18,872	0,000	12,589	6,369	22,281	21,760	5,799	12,330
14	13,232	0,868	15,837	16,551	5,474	22,663	16,084	9,293
15	13,633	0,000	16,777	13,458	13,834	21,430	12,898	7,972
16	4,140	0,067	24,944	14,841	0,610	23,570	28,417	3,412
17	6,134	0,000	24,205	17,871	3,467	25,465	22,040	0,819
18	9,632	0,000	20,710	15,220	8,342	24,345	17,020	4,731
19	13,548	0,041	21,022	13,428	9,908	21,552	14,289	6,214
20	14,500	3,835	13,666	10,902	13,583	23,979	10,515	9,020
21	8,894	0,000	24,092	24,120	0,929	19,483	20,576	1,906
22	14,782	0,186	26,473	12,222	1,831	19,856	17,845	6,805
23	15,475	0,224	24,628	10,326	2,433	22,210	17,094	7,611
24	16,423	0,211	21,150	10,206	3,210	21,635	17,336	9,829
25	19,805	0,000	28,796	7,908	2,576	20,543	13,990	6,385

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA GERAL (% v/v)							
	Aromáticos	C14+	Iso-parafinas	Naftênicos	Olefinas	Oxigenados	Parafinas	Desconhecidos
Teste								
1	17,768	0,037	16,696	6,718	15,884	22,063	8,720	12,116
2	14,170	0,199	20,462	11,403	9,999	20,806	13,891	9,071
3	14,346	0,138	16,090	13,415	14,240	20,734	11,261	9,775
4	11,871	0,392	19,629	16,567	1,918	22,678	17,106	9,839
5	7,579	0,000	22,528	16,979	5,339	25,391	19,973	2,211
6	14,471	0,000	15,626	13,085	14,020	22,424	11,260	9,115
7	11,338	1,810	13,192	11,333	11,080	33,302	11,403	6,543
8	17,192	1,212	12,722	6,052	21,732	25,848	5,787	9,457
9	14,899	1,266	16,972	13,085	7,809	21,283	15,638	9,048
10	14,743	0,000	15,726	13,152	14,287	21,923	10,960	9,209

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIS COM 66, 35, 32 E 24 VARIÁVEIS – TREINAMENTO E TESTE.

continua

Amostra nº	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
	AC6	AC7	AC8	AC9	AC10	AC11	AC12	AC13	AC14	AC15
Treino										
1	0,199	0,984	2,067	4,013	3,918	1,568	0,948	0,022	0,000	0,000
2	0,182	5,359	2,104	3,181	2,736	1,208	1,039	0,055	0,024	0,000
3	0,447	1,930	3,445	3,994	2,701	1,329	0,947	0,015	0,000	0,000
4	0,284	1,265	2,390	3,735	3,189	1,381	0,915	0,028	0,000	0,000
5	0,408	1,738	3,079	3,726	2,581	1,262	0,915	0,025	0,000	0,000
6	0,460	1,479	3,310	3,723	2,358	1,218	0,895	0,022	0,002	0,000
7	0,512	1,221	3,541	3,721	2,136	1,174	0,876	0,020	0,005	0,000
8	0,362	1,554	2,739	3,119	2,181	1,002	0,740	0,014	0,000	0,000
9	0,465	1,941	3,409	3,704	2,461	1,104	0,833	0,000	0,000	0,000
10	0,460	1,958	3,387	3,706	2,580	1,134	0,841	0,000	0,000	0,000
11	0,531	1,354	1,749	3,351	3,947	1,166	0,716	0,027	0,013	0,000
12	0,323	3,553	2,252	2,796	2,381	1,008	0,801	0,048	0,021	0,000
13	0,491	2,439	4,021	5,544	3,809	1,376	1,193	0,000	0,000	0,000
14	0,467	1,559	1,922	4,980	2,314	1,196	0,742	0,027	0,026	0,000
15	0,553	2,068	3,408	3,645	2,352	0,906	0,701	0,000	0,000	0,000
16	0,074	0,552	1,170	1,063	0,818	0,292	0,171	0,000	0,000	0,000
17	1,396	2,507	0,756	0,797	0,472	0,126	0,080	0,000	0,000	0,000
18	0,850	2,168	2,013	2,284	1,434	0,485	0,388	0,012	0,000	0,000
19	0,360	1,985	3,522	3,838	2,313	0,930	0,576	0,000	0,024	0,000
20	0,450	1,758	3,007	3,263	2,122	2,104	1,670	0,025	0,071	0,032
21	0,085	2,577	4,825	0,743	0,459	0,140	0,065	0,000	0,000	0,000
22	0,174	8,975	0,840	1,776	2,166	0,552	0,299	0,000	0,000	0,000
23	0,450	3,854	3,713	4,069	2,195	0,764	0,431	0,000	0,000	0,000
24	0,097	8,345	1,002	2,765	2,804	0,908	0,504	0,000	0,000	0,000
25	0,085	13,752	0,820	2,277	2,007	0,564	0,301	0,000	0,000	0,000

Amostra nº	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
	AC6	AC7	AC8	AC9	AC10	AC11	AC12	AC13	AC14	AC15
Teste										
1	0,343	3,158	3,411	4,458	3,711	1,480	1,184	0,022	0,000	0,000
2	0,338	3,573	2,512	3,165	2,494	1,208	0,848	0,033	0,000	0,000
3	0,440	1,909	3,313	3,840	2,658	1,242	0,923	0,021	0,000	0,000
4	0,291	1,061	1,096	5,551	2,387	0,899	0,544	0,030	0,013	0,000
5	1,170	2,396	1,308	1,372	0,825	0,283	0,225	0,000	0,000	0,000
6	0,495	1,983	3,438	3,904	2,627	1,149	0,862	0,013	0,000	0,000
7	0,386	1,583	2,698	2,870	2,153	0,948	0,659	0,043	0,000	0,000
8	0,481	2,192	4,146	4,845	3,313	1,169	1,045	0,000	0,000	0,000
9	0,335	2,761	3,946	3,202	2,929	1,018	0,679	0,000	0,029	0,000
10	0,478	1,997	3,484	3,980	2,702	1,191	0,900	0,012	0,000	0,000

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIS COM 66, 35, 32 E 24 VARIÁVEIS - TREINAMENTO E TESTE.

continua

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Treino	C14	C15	IC5	IC6	IC7	IC8	IC9	IC10	IC11	IC12
1	0,154	0,032	1,400	4,061	1,103	0,827	1,261	2,191	0,578	0,131
2	0,763	0,000	1,369	4,784	7,235	2,831	1,603	1,289	0,306	0,098
3	0,000	0,000	3,869	3,808	2,606	1,744	2,198	1,193	0,180	0,041
4	0,228	0,015	2,381	5,174	1,380	1,096	1,347	1,540	0,399	0,100
5	0,151	0,001	3,616	5,048	2,132	1,555	1,816	1,041	0,200	0,055
6	0,097	0,006	4,160	5,284	1,752	1,527	1,901	0,836	0,134	0,040
7	0,043	0,011	4,704	5,520	1,372	1,499	1,986	0,631	0,067	0,025
8	0,141	0,148	3,304	3,305	2,230	1,416	1,770	0,808	0,136	0,031
9	0,000	0,000	4,172	4,093	2,766	1,826	2,308	1,148	0,152	0,034
10	0,000	0,000	4,156	3,976	2,658	1,790	2,232	1,137	0,150	0,034
11	0,265	0,000	2,391	4,862	2,535	1,164	1,033	2,828	0,627	0,080
12	0,647	0,000	2,510	2,992	7,113	3,211	1,911	1,495	0,311	0,092
13	0,000	0,000	3,184	3,088	1,962	1,661	1,693	0,792	0,160	0,049
14	0,812	0,055	1,357	5,319	4,092	1,936	1,362	1,387	0,272	0,095
15	0,000	0,000	4,327	4,234	2,841	1,827	2,178	1,160	0,175	0,036
16	0,069	0,000	1,901	4,359	6,526	6,535	3,240	2,024	0,302	0,057
17	0,000	0,000	5,475	8,526	7,180	2,434	0,430	0,142	0,017	0,000
18	0,000	0,000	4,779	6,438	5,075	2,322	1,366	0,602	0,109	0,019
19	0,042	0,000	6,308	5,314	3,339	2,429	2,424	1,100	0,089	0,018
20	0,986	2,849	3,435	3,393	2,299	1,528	1,832	0,989	0,147	0,044
21	0,000	0,000	0,353	3,834	3,048	9,306	7,041	0,430	0,066	0,013
22	0,019	0,167	0,786	9,055	8,350	3,738	1,240	2,714	0,521	0,070
23	0,081	0,142	1,689	6,514	9,640	3,408	1,046	1,787	0,440	0,103
24	0,195	0,016	0,813	12,688	1,944	0,674	1,202	3,194	0,547	0,088
25	0,000	0,000	0,555	6,718	12,883	4,623	1,084	2,477	0,410	0,046

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Teste	C14	C15	IC5	IC6	IC7	IC8	IC9	IC10	IC11	IC12
1	0,037	0,000	2,249	4,065	4,862	2,254	1,502	1,351	0,333	0,079
2	0,199	0,000	3,011	5,035	5,770	3,024	1,912	1,388	0,257	0,067
3	0,026	0,112	4,136	3,998	2,680	1,754	2,130	1,168	0,183	0,042
4	0,342	0,051	0,443	6,583	6,404	2,684	1,028	1,902	0,475	0,111
5	0,000	0,000	5,065	7,671	6,368	2,293	0,768	0,319	0,045	0,000
6	0,000	0,000	3,978	3,847	2,599	1,729	2,093	1,159	0,182	0,039
7	0,805	1,005	3,328	3,364	2,295	1,507	1,771	0,834	0,064	0,028
8	0,494	0,718	3,417	3,219	1,950	1,610	1,719	0,730	0,125	0,043
9	0,359	0,907	2,404	6,281	2,974	1,438	1,514	1,884	0,407	0,070
10	0,000	0,000	3,997	3,877	2,633	1,732	2,116	1,155	0,177	0,041

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIS COM 66, 35, 32 E 24 VARIÁVEIS – TREINAMENTO E TESTE.

continua

Amostra nº	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
	NC5	NC6	NC7	NC8	NC9	NC10	NC12	OLC4	OLC5	OLC6
Treino										
1	0,248	3,566	1,618	1,232	1,116	0,718	0,060	0,923	3,809	9,514
2	0,196	2,012	1,408	1,740	1,241	0,347	0,048	0,745	4,152	3,062
3	0,376	2,731	4,251	4,199	1,658	0,213	0,080	0,736	5,897	4,417
4	1,089	8,826	1,934	2,014	1,227	0,477	0,056	0,533	4,235	3,155
5	1,153	8,409	3,251	3,498	1,498	0,225	0,066	0,440	5,279	0,606
6	1,423	10,058	3,630	3,978	1,573	0,139	0,068	0,322	5,581	1,166
7	1,694	11,708	4,009	4,459	1,648	0,053	0,070	0,204	5,884	2,938
8	0,348	2,387	3,561	3,323	1,244	0,140	0,043	0,613	5,120	3,829
9	0,378	2,794	4,368	4,273	1,634	0,196	0,066	0,784	6,134	4,537
10	0,377	2,737	4,301	4,156	1,567	0,203	0,068	0,803	6,313	4,597
11	0,655	6,536	3,271	1,554	0,987	0,846	0,099	0,460	3,139	2,219
12	0,284	1,947	3,231	2,308	1,484	0,378	0,039	0,382	3,448	2,492
13	0,157	1,257	1,822	2,068	0,810	0,145	0,110	1,254	9,539	7,314
14	0,693	4,560	6,891	2,703	1,249	0,365	0,089	0,226	2,244	1,640
15	0,360	2,750	4,342	4,223	1,541	0,196	0,046	0,657	6,144	4,412
16	0,268	3,051	6,354	3,185	1,588	0,371	0,025	0,018	0,185	0,102
17	0,675	5,854	9,006	2,227	0,080	0,016	0,013	0,198	1,582	0,984
18	0,512	4,249	6,495	3,042	0,808	0,090	0,025	0,442	3,705	2,706
19	0,344	2,729	4,302	3,628	1,359	1,028	0,038	0,712	4,294	3,027
20	0,293	2,213	3,456	3,465	1,265	0,172	0,038	0,618	5,311	3,911
21	0,277	1,550	7,370	11,131	3,661	0,118	0,013	0,000	0,263	0,166
22	0,441	5,441	2,873	1,395	1,289	0,731	0,052	0,055	0,407	0,545
23	0,346	3,220	3,444	1,580	1,119	0,544	0,073	0,132	0,721	0,659
24	0,335	4,508	1,495	1,197	1,723	0,873	0,075	0,123	1,039	1,065
25	0,233	2,456	1,790	1,588	1,180	0,607	0,054	0,110	0,794	0,705

Amostra nº	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
	NC5	NC6	NC7	NC8	NC9	NC10	NC12	OLC4	OLC5	OLC6
Teste										
1	0,201	1,536	1,841	1,674	1,051	0,345	0,070	1,129	6,688	4,930
2	0,316	2,536	3,508	3,114	1,526	0,307	0,096	0,523	4,192	3,153
3	0,385	2,782	4,281	4,156	1,552	0,205	0,055	0,777	6,112	4,492
4	0,796	5,182	6,848	1,735	1,276	0,646	0,084	0,068	0,636	0,474
5	0,611	5,291	8,106	2,471	0,435	0,051	0,015	0,264	2,369	1,712
6	0,373	2,691	4,174	4,071	1,518	0,204	0,054	0,748	6,084	4,436
7	0,316	2,353	3,690	3,502	1,252	0,147	0,073	0,590	4,753	3,557
8	0,152	1,239	1,768	1,968	0,714	0,120	0,091	1,350	9,262	6,860
9	0,362	3,216	4,173	3,198	1,516	0,585	0,036	0,364	3,296	2,435
10	0,381	2,711	4,184	4,085	1,534	0,201	0,056	0,790	6,146	4,489

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIS COM 66, 35, 32 E 24 VARIÁVEIS – TREINAMENTO E TESTE.

continua

Amostra nº	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Treino	OLC7	OLC8	OLC9	OLC10	OLC11	OLC12	OLC13	OLC14	OLC15	OLC16
1	0,900	0,369	0,462	0,000	0,154	0,078	0,062	0,000	0,000	0,000
2	1,012	0,439	0,484	0,000	0,093	0,062	0,097	0,019	0,019	0,000
3	1,412	0,588	0,686	0,014	0,078	0,030	0,039	0,000	0,000	0,000
4	0,999	0,424	0,496	0,000	0,121	0,066	0,066	0,027	0,000	0,000
5	1,255	0,534	0,608	0,007	0,083	0,042	0,055	0,027	0,000	0,000
6	1,325	0,565	0,638	0,008	0,072	0,035	0,050	0,033	0,002	0,000
7	1,394	0,596	0,669	0,010	0,060	0,028	0,045	0,039	0,004	0,000
8	1,214	0,522	0,549	0,000	0,057	0,019	0,029	0,000	0,000	0,000
9	1,433	0,616	0,685	0,014	0,068	0,025	0,031	0,000	0,000	0,000
10	1,570	0,645	0,654	0,014	0,070	0,024	0,028	0,000	0,000	0,000
11	0,647	0,277	0,359	0,000	0,140	0,043	0,048	0,000	0,000	0,000
12	0,812	0,372	0,488	0,000	0,087	0,056	0,081	0,015	0,016	0,000
13	2,347	0,976	0,688	0,026	0,099	0,014	0,024	0,000	0,000	0,000
14	0,452	0,238	0,408	0,000	0,080	0,053	0,088	0,026	0,019	0,000
15	1,264	0,591	0,635	0,014	0,070	0,027	0,022	0,000	0,000	0,000
16	0,051	0,022	0,173	0,000	0,043	0,000	0,017	0,000	0,000	0,000
17	0,458	0,104	0,128	0,000	0,013	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
18	0,800	0,216	0,379	0,000	0,042	0,035	0,000	0,000	0,000	0,000
19	0,876	0,412	0,473	0,000	0,048	0,067	0,000	0,000	0,000	0,000
20	1,256	0,508	0,571	0,000	0,058	0,032	0,031	0,062	1,225	0,000
21	0,042	0,071	0,368	0,000	0,020	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
22	0,202	0,086	0,305	0,098	0,029	0,017	0,000	0,000	0,000	0,087
23	0,349	0,117	0,269	0,000	0,091	0,045	0,051	0,000	0,000	0,000
24	0,180	0,095	0,468	0,000	0,120	0,049	0,045	0,027	0,000	0,000
25	0,385	0,166	0,309	0,000	0,086	0,021	0,000	0,000	0,000	0,000

Amostra nº	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Teste	OLC7	OLC8	OLC9	OLC10	OLC11	OLC12	OLC13	OLC14	OLC15	OLC16
1	1,643	0,679	0,588	0,015	0,113	0,052	0,046	0,000	0,000	0,000
2	0,965	0,444	0,544	0,000	0,077	0,038	0,063	0,000	0,000	0,000
3	1,419	0,613	0,663	0,013	0,077	0,030	0,044	0,000	0,000	0,000
4	0,168	0,025	0,326	0,000	0,105	0,057	0,059	0,000	0,000	0,000
5	0,629	0,092	0,222	0,000	0,024	0,027	0,000	0,000	0,000	0,000
6	1,380	0,577	0,661	0,000	0,075	0,029	0,031	0,000	0,000	0,000
7	1,034	0,490	0,506	0,000	0,050	0,074	0,026	0,000	0,000	0,000
8	2,176	0,906	0,726	0,025	0,085	0,111	0,016	0,000	0,000	0,212
9	0,696	0,323	0,502	0,000	0,105	0,041	0,033	0,013	0,000	0,000
10	1,425	0,618	0,670	0,014	0,076	0,027	0,033	0,000	0,000	0,000

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIS COM 66, 35, 32 E 24 VARIÁVEIS – TREINAMENTO E TESTE.

continua

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Treino	OX2	OX3	OX4	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8	PC9
1	23,023	0,000	0,000	0,038	0,343	0,616	1,977	0,694	0,867	0,725
2	23,308	0,024	0,000	0,000	0,219	0,485	2,366	2,428	1,501	0,624
3	21,469	0,000	0,000	0,000	0,353	2,854	2,062	1,846	2,121	0,735
4	23,243	0,000	0,000	0,000	0,220	1,628	4,470	0,900	1,173	0,663
5	22,466	0,000	0,000	0,019	0,225	2,747	4,513	1,476	1,800	0,668
6	22,348	0,002	0,000	0,030	0,202	3,288	5,230	1,480	1,954	0,661
7	22,230	0,005	0,000	0,042	0,178	3,828	5,948	1,483	2,108	0,653
8	36,055	0,000	0,000	0,000	0,263	2,389	1,716	1,465	1,605	0,487
9	20,910	0,000	0,016	0,000	0,408	3,174	2,314	2,043	2,205	0,801
10	21,954	0,000	0,016	0,000	0,399	3,055	2,167	1,916	2,106	0,733
11	23,813	0,000	0,000	0,000	0,481	2,250	4,321	2,138	0,841	0,639
12	22,955	0,000	0,000	0,000	0,480	2,082	1,774	3,253	2,010	1,111
13	21,734	0,000	0,026	0,000	0,388	1,206	0,784	0,974	1,580	0,300
14	22,663	0,000	0,000	0,000	0,131	2,027	4,307	3,404	1,037	0,967
15	21,430	0,000	0,000	0,000	0,518	3,389	2,519	2,293	2,265	0,896
16	23,570	0,000	0,000	0,176	1,784	2,968	4,926	6,336	5,579	3,250
17	25,465	0,000	0,000	0,000	1,324	6,644	7,035	6,068	0,816	0,052
18	24,345	0,000	0,000	0,000	0,914	4,908	4,804	4,166	1,452	0,343
19	21,552	0,000	0,000	0,028	0,867	4,054	2,757	2,362	2,217	1,215
20	23,979	0,000	0,000	0,000	0,363	2,632	1,930	1,714	1,888	0,699
21	19,483	0,000	0,000	0,000	0,047	0,787	2,117	4,744	10,510	1,772
22	19,856	0,000	0,000	0,000	0,170	0,920	6,572	3,305	1,547	1,192
23	22,210	0,000	0,000	0,000	0,418	1,972	4,311	3,998	1,378	1,047
24	21,635	0,000	0,000	0,000	0,100	0,691	8,853	0,807	0,641	1,429
25	20,543	0,000	0,000	0,000	0,085	0,436	3,845	4,116	1,666	1,138

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Teste	OX2	OX3	OX4	PC3	PC4	PC5	PC6	PC7	PC8	PC9
1	22,026	0,018	0,018	0,000	0,332	0,834	1,750	1,835	1,409	0,534
2	20,806	0,000	0,000	0,000	0,301	2,418	2,917	2,766	2,081	1,042
3	20,718	0,000	0,016	0,000	0,386	3,040	2,161	1,893	2,079	0,722
4	22,678	0,000	0,000	0,000	0,041	1,603	5,270	4,017	0,875	1,080
5	25,391	0,000	0,000	0,000	1,034	5,878	6,184	5,352	1,075	0,200
6	22,424	0,000	0,000	0,000	0,403	2,991	2,136	1,882	2,110	0,747
7	33,302	0,000	0,000	0,000	0,331	2,631	1,980	1,828	1,821	0,653
8	25,804	0,020	0,024	0,000	0,442	1,173	0,746	0,903	1,457	0,275
9	21,283	0,000	0,000	0,000	0,258	2,422	4,733	2,461	1,621	1,071
10	21,923	0,000	0,000	0,000	0,427	2,928	2,089	1,846	2,041	0,710

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIIS COM 66, 35, 32 E 24 VARIÁVEIS - TREINAMENTO E TESTE.

continua

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Treino	PC10	PC11	PC12	PC13	PC14	PC15	PC16	DC5	DC6	DC7
1	1,966	1,546	1,181	0,469	0,211	0,133	0,066	0,095	0,302	0,660
2	0,806	0,680	0,913	0,741	0,385	0,325	0,051	0,104	0,305	0,643
3	0,483	0,243	0,159	0,094	0,000	0,000	0,000	0,144	0,550	0,992
4	1,176	0,974	0,908	0,404	0,179	0,116	0,076	0,110	0,344	0,640
5	0,435	0,323	0,397	0,217	0,073	0,050	0,043	0,135	0,468	0,806
6	0,165	0,107	0,240	0,132	0,025	0,012	0,041	0,143	0,505	0,835
7	0,104	0,108	0,082	0,048	0,023	0,026	0,039	0,152	0,542	0,864
8	0,309	0,154	0,105	0,067	0,017	0,000	0,000	0,121	0,440	0,793
9	0,490	0,239	0,154	0,085	0,000	0,000	0,000	0,152	0,562	1,008
10	0,464	0,236	0,153	0,083	0,019	0,000	0,000	0,156	0,567	1,096
11	2,542	1,390	0,652	0,374	0,199	0,143	0,034	0,081	0,223	0,427
12	0,932	0,701	0,833	0,645	0,339	0,262	0,039	0,091	0,252	1,562
13	0,214	0,158	0,139	0,057	0,000	0,000	0,000	0,247	0,911	1,757
14	0,888	0,714	0,865	1,007	0,396	0,290	0,051	0,061	0,173	0,564
15	0,537	0,252	0,148	0,067	0,014	0,000	0,000	0,162	0,552	0,930
16	1,725	0,890	0,425	0,182	0,093	0,053	0,030	0,000	0,000	0,123
17	0,040	0,027	0,022	0,000	0,000	0,014	0,000	0,033	0,086	0,341
18	0,224	0,114	0,067	0,029	0,000	0,000	0,000	0,089	0,264	1,005
19	0,406	0,174	0,120	0,066	0,023	0,000	0,000	0,103	0,319	0,617
20	0,443	0,234	0,270	0,071	0,239	0,000	0,032	0,138	0,473	0,855
21	0,285	0,184	0,083	0,034	0,015	0,000	0,000	0,000	0,000	0,093
22	2,056	1,380	0,446	0,151	0,077	0,031	0,000	0,027	0,032	0,124
23	1,471	1,173	0,732	0,426	0,113	0,040	0,015	0,000	0,055	0,211
24	2,087	1,276	0,691	0,465	0,173	0,086	0,038	0,000	0,051	0,081
25	1,466	0,888	0,260	0,078	0,013	0,000	0,000	0,000	0,061	0,252

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)									
Teste	PC10	PC11	PC12	PC13	PC14	PC15	PC16	DC5	DC6	DC7
1	0,757	0,565	0,452	0,174	0,056	0,023	0,000	0,166	0,643	1,151
2	0,767	0,520	0,460	0,352	0,173	0,074	0,020	0,105	0,355	0,684
3	0,472	0,238	0,157	0,095	0,019	0,000	0,000	0,146	0,553	0,983
4	1,400	1,139	0,848	0,484	0,217	0,104	0,027	0,000	0,015	0,119
5	0,126	0,066	0,040	0,020	0,000	0,000	0,000	0,055	0,178	0,511
6	0,494	0,244	0,154	0,085	0,015	0,000	0,000	0,155	0,555	0,978
7	0,386	0,187	0,153	0,075	0,019	0,247	1,094	0,119	0,400	0,777
8	0,188	0,135	0,122	0,039	0,046	0,085	0,176	0,226	0,836	1,617
9	1,442	0,894	0,474	0,191	0,070	0,000	0,000	0,085	0,233	0,489
10	0,461	0,231	0,148	0,081	0,000	0,000	0,000	0,153	0,559	0,997

TABELA 1.2 - DADOS DE ENTRADA PARA REDES NEURONAIIS COM 66,
35, 32 E 24 VARIÁVEIS – TREINAMENTO E TESTE

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)						conclusão
	DC8	DC9	DC10	DC11	DC12	DC13	
Treino							
1	0,652	1,912	3,277	3,328	1,027	0,562	
2	0,936	1,248	1,856	2,637	2,528	1,545	
3	1,098	1,246	1,461	1,951	1,887	0,405	
4	0,758	1,458	2,403	2,868	1,969	0,734	
5	0,981	1,125	1,495	2,180	2,399	0,656	
6	1,029	0,989	1,193	1,973	2,617	0,593	
7	1,077	0,852	0,892	1,766	2,836	0,531	
8	0,872	0,938	1,005	1,420	1,360	0,421	
9	1,202	1,141	1,222	1,614	1,588	0,228	
10	0,983	1,160	1,223	1,594	1,482	0,175	
11	0,511	1,534	3,488	1,989	1,349	0,669	
12	0,691	1,231	1,789	2,229	2,072	1,283	
13	2,617	0,881	1,595	2,427	1,754	0,142	
14	0,496	1,060	1,635	1,987	2,123	1,195	
15	1,049	1,166	1,299	1,531	1,131	0,154	
16	0,371	0,772	1,062	0,636	0,368	0,081	
17	0,098	0,030	0,079	0,088	0,066	0,000	
18	0,740	0,711	0,712	0,741	0,469	0,000	
19	0,695	0,751	1,195	1,479	0,860	0,195	
20	0,943	0,970	0,978	1,581	1,940	1,142	
21	0,951	0,276	0,443	0,122	0,021	0,000	
22	0,359	1,617	2,798	1,270	0,526	0,052	
23	0,309	1,298	2,369	1,786	1,249	0,333	
24	0,527	2,194	3,283	2,010	1,246	0,437	
25	0,327	1,648	2,461	1,325	0,311	0,000	

Amostra n°	COMPOSIÇÃO QUÍMICA DETALHADA (% v/v)						conclusão
	DC8	DC9	DC10	DC11	DC12	DC13	
Teste							
1	1,055	1,448	2,089	2,869	2,193	0,503	
2	0,844	1,113	1,482	1,794	1,853	0,842	
3	1,102	1,228	1,439	1,918	1,866	0,541	
4	0,348	1,658	2,911	2,357	1,592	0,838	
5	0,289	0,281	0,336	0,326	0,236	0,000	
6	1,087	1,216	1,434	1,815	1,572	0,302	
7	0,866	0,915	0,703	0,968	1,197	0,600	
8	1,203	0,801	1,253	1,960	1,492	0,070	
9	0,631	1,532	2,391	2,077	1,298	0,313	
10	1,100	1,204	1,403	1,866	1,622	0,307	

TABELA 1.3 - DADOS DE SAÍDA PARA TODAS AS REDES NEURONAIS - TREINAMENTO E TESTE.

Amostra nº	PROPRIEDADES FISICO-QUIMICAS GASOLINA C						
	Densidade	PVReid	PIE (°C)	T ₁₀ (°C)	T ₅₀ (°C)	T ₉₀ (°C)	PFE (°C)
Treino	(g/cm ³)	(kPa)					
1	0,7608	42,9	47,7	61,3	74,6	194,8	238,0
2	0,7658	38,0	51,7	64,0	74,5	203,2	241,9
3	0,7585	48,9	44,8	57,5	73,5	176,7	216,3
4	0,7618	43,7	48,2	59,3	73,2	192,8	233,8
5	0,7605	48,7	44,7	57,7	73,9	171,0	214,6
6	0,7583	47,5	44,5	58,0	73,7	173,9	215,8
7	0,7590	45,2	46,4	59,1	74,0	187,4	228,2
8	0,7719	46,1	45,1	59,7	75,4	162,8	211,5
9	0,7577	49,2	44,4	57,7	73,6	175,5	216,5
10	0,7588	48,8	44,7	57,0	73,7	176,7	224,7
11	0,7594	42,1	48,1	60,3	74,0	187,5	234,7
12	0,7619	38,6	51,4	63,7	74,9	194,8	242,4
13	0,7652	53,8	41,8	55,3	74,2	180,2	219,4
14	0,7617	49,2	52,8	63,7	73,6	197,3	243,9
15	0,7558	48,6	45,8	57,5	73,4	170,1	220,3
16	0,7390	43,7	49,5	63,9	73,6	160,9	230,3
17	0,7295	56,5	43,4	53,6	66,8	75,0	177,1
18	0,7402	54,4	43,4	54,6	69,8	139,8	200,2
19	0,7534	54,8	42,1	56,2	73,5	170,2	216,5
20	0,7597	48,8	45,3	57,2	73,8	171,0	212,7
21	0,7521	25,5	65,2	71,3	78,1	136,0	179,9
22	0,7522	32,8	57,7	64,8	72,3	174,5	211,7
23	0,7565	35,0	54,5	65,2	74,0	181,3	220,5
24	0,7637	33,1	56,5	64,6	74,0	187,8	238,2
25	0,7600	29,1	61,4	68,0	73,8	170,5	210,5

Amostra nº	PROPRIEDADES FISICO-QUIMICAS GASOLINA C						
	Densidade	PVReid	PIE (°C)	T ₁₀ (°C)	T ₅₀ (°C)	T ₉₀ (°C)	PFE (°C)
Teste	(g/cm ³)	(kPa)					
1	0,7640	45,8	44,9	59,4	74,2	185,8	219,5
2	0,7596	41,3	49,1	60,8	74,0	186,8	232,7
3	0,7585	48,4	44,9	58,4	73,8	177,3	217,3
4	0,7603	30,6	58,4	66,4	73,8	187,8	234,6
5	0,7352	54,6	43,5	54,5	68,1	118,2	196,0
6	0,7584	49,8	44,4	58,0	73,6	176,6	219,1
7	0,7648	48,0	45,2	59,2	74,6	166,1	212,3
8	0,7673	53,4	42,9	56,2	74,7	177,1	215,7
9	0,7597	40,1	50,4	62,0	74,3	183,7	226,1
10	0,7580	49,1	45,3	57,2	73,5	174,2	219,2

APÊNDICE 2 – PONTOS EXPERIMENTAIS x CALCULADOS PELAS REDES.

TABELA 2.1 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA DENSIDADE -
DADOS DE TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

Densidade experimental (g/cm ³)	Densidade calculada (g/cm ³)	Desvio relativo %
0,7608	0,7610	-0,02
0,7658	0,7661	-0,03
0,7585	0,7579	0,08
0,7618	0,7619	-0,02
0,7605	0,7619	-0,19
0,7583	0,7590	-0,09
0,7590	0,7583	0,09
0,7719	0,7709	0,13
0,7577	0,7568	0,12
0,7588	0,7585	0,04
0,7594	0,7595	-0,01
0,7619	0,7615	0,05
0,7652	0,7653	-0,02
0,7617	0,7619	-0,03
0,7558	0,7567	-0,13
0,7390	0,7391	-0,02
0,7295	0,7295	0,01
0,7402	0,7400	0,03
0,7534	0,7534	-0,01
0,7597	0,7597	0,00
0,7521	0,7521	0,00
0,7522	0,7522	-0,01
0,7565	0,7565	0,00
0,7637	0,7636	0,01
0,7600	0,7602	-0,03

TABELA 2.2 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA DENSIDADE
- DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

Densidade experimental (g/cm ³)	Densidade calculada (g/cm ³)	Desvio relativo %
0,7640	0,7640	0,00
0,7596	0,7606	-0,13
0,7585	0,7579	0,08
0,7603	0,7597	0,08
0,7352	0,7358	-0,08
0,7584	0,7589	-0,07
0,7648	0,7647	0,01
0,7673	0,7661	0,16
0,7597	0,7594	0,04
0,7580	0,7586	-0,08

TABELA 2.3 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA DENSIDADE -
DADOS DE TREINO – REDE SIMPLES.

Densidade experimental (g/cm ³)	Densidade calculada (g/cm ³)	Desvio relativo %
0,7608	0,7600	0,11
0,7658	0,7646	0,16
0,7585	0,7591	-0,08
0,7618	0,7631	-0,17
0,7605	0,7615	-0,14
0,7583	0,7571	0,16
0,7590	0,7626	-0,48
0,7719	0,7700	0,24
0,7577	0,7566	0,15
0,7588	0,7571	0,23
0,7594	0,7599	-0,06
0,7619	0,7610	0,12
0,7652	0,7649	0,04
0,7617	0,7602	0,20
0,7558	0,7558	-0,01
0,7390	0,7376	0,19
0,7295	0,7289	0,09
0,7402	0,7442	-0,54
0,7534	0,7514	0,26
0,7597	0,7617	-0,26
0,7521	0,7520	0,01
0,7522	0,7521	0,01
0,7565	0,7592	-0,35
0,7637	0,7615	0,28
0,7600	0,7611	-0,14

TABELA 2.4 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA DENSIDADE -
DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

Densidade experimental (g/cm ³)	Densidade calculada (g/cm ³)	Desvio relativo %
0,7640	0,7645	-0,07
0,7596	0,7591	0,07
0,7585	0,7584	0,01
0,7603	0,7600	0,04
0,7352	0,7335	0,23
0,7584	0,7589	-0,07
0,7648	0,7665	-0,22
0,7673	0,7683	-0,13
0,7597	0,7583	0,18
0,7580	0,7588	-0,11

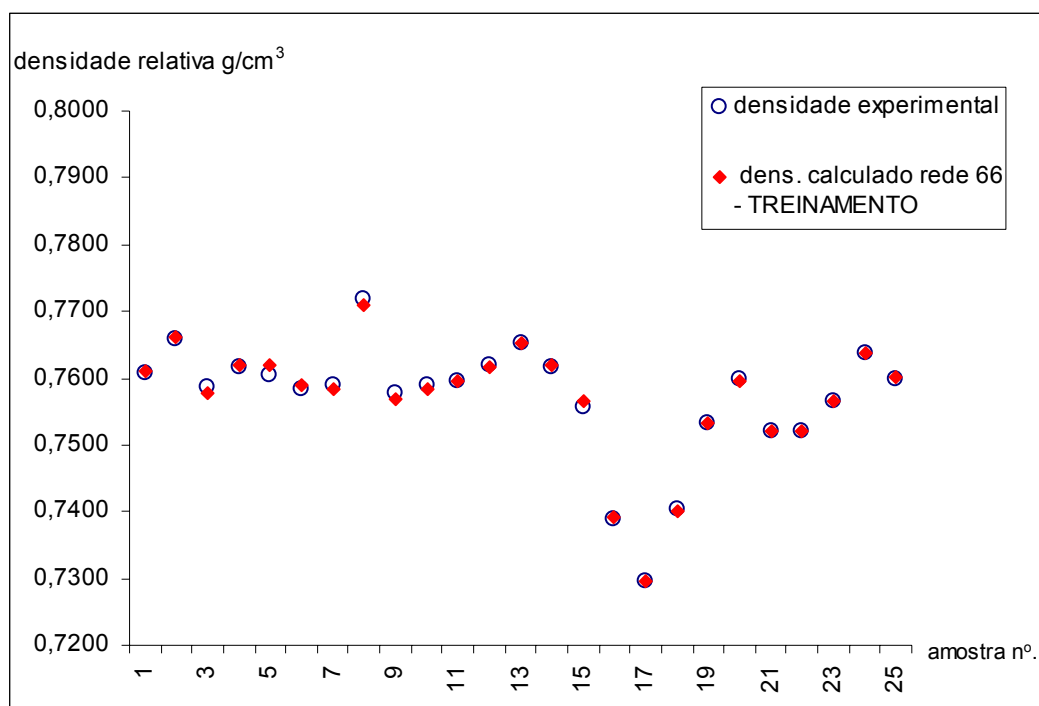


FIGURA 2.1 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA DENSIDADE – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

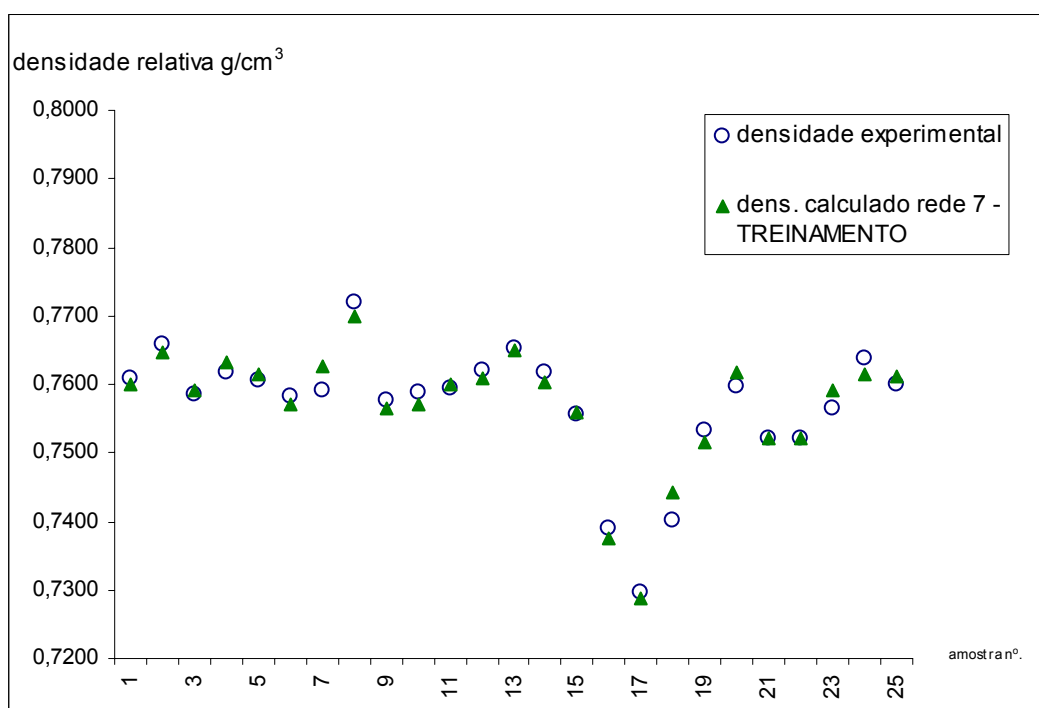


FIGURA 2.2 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA DENSIDADE – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

TABELA 2.5 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PV REID - DADOS DE TREINAMENTO- REDE COMPLEXA.

PVR experimental (kPa)	PVR calculada (kPa)	Desvio relativo %
42,9	42,9	-0,02
38,0	38,3	-0,89
48,9	48,1	1,69
43,7	41,7	4,48
48,7	47,6	2,29
47,5	49,4	-3,94
45,2	46,1	-1,91
46,1	46,7	-1,26
49,2	49,9	-1,46
48,8	50,5	-3,51
42,1	45,2	-7,34
38,6	41,1	-6,60
53,8	52,0	3,29
36,8	37,0	-0,55
48,6	49,2	-1,20
43,7	43,5	0,46
56,5	57,3	-1,43
54,4	51,6	5,09
54,8	52,7	3,78
48,8	47,4	2,89
25,5	25,6	-0,23
32,8	31,7	3,29
35,0	35,5	-1,44
33,1	33,6	-1,44
29,1	27,7	4,81

TABELA 2.6 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PV REID - DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

PVR experimental (kPa)	PVR calculada (kPa)	Desvio relativo %
45,8	46,6	-1,65
41,3	42,6	-3,11
48,4	49,4	-2,08
30,6	30,2	1,19
54,6	54,2	0,67
49,8	48,8	1,99
48,0	47,1	1,79
53,4	52,8	1,03
40,1	41,2	-2,65
49,1	49,4	-0,55

TABELA 2.7 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PV REID - DADOS DE TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

PVR experimental (kPa)	PVR calculada (kPa)	Desvio relativo %
42,9	43,5	-1,34
38,0	39,0	-2,70
48,9	46,8	4,34
43,7	41,9	4,20
48,7	49,0	-0,52
47,5	48,2	-1,49
45,2	45,7	-1,14
46,1	45,9	0,44
49,2	48,9	0,53
48,8	50,9	-4,30
42,1	40,9	2,95
38,6	38,0	1,49
53,8	53,6	0,39
36,8	39,1	-6,14
48,6	50,9	-4,66
43,7	44,1	-1,00
56,5	55,3	2,05
54,4	55,3	-1,60
54,8	51,3	6,31
48,8	48,2	1,14
25,5	25,5	-0,18
32,8	31,9	2,66
35,0	37,5	-7,27
33,1	31,3	5,43
29,1	29,7	-2,05

TABELA 2.8 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PV REID - DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

PVR experimental (kPa)	PVR calculada (kPa)	Desvio relativo %
45,8	45,2	1,29
41,3	42,9	-3,79
48,4	46,1	4,83
30,6	31,8	-3,80
54,6	55,6	-1,79
49,8	49,3	1,07
48,0	47,7	0,65
53,4	50,8	4,94
40,1	41,4	-3,25
49,1	48,7	0,78

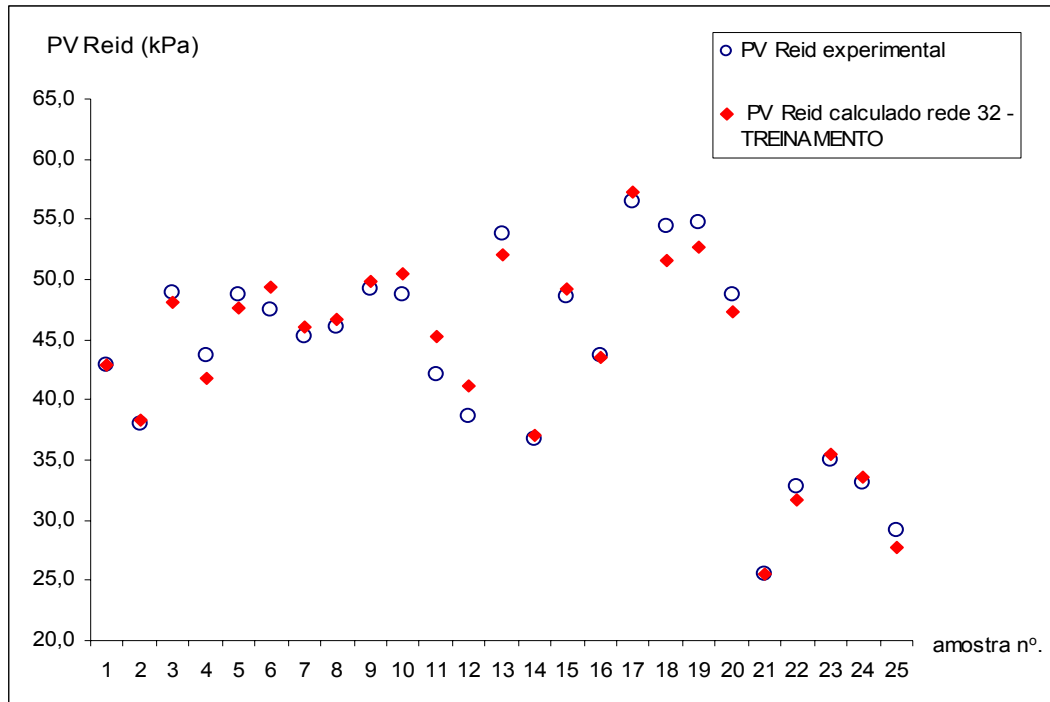


FIGURA 2.3 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA PV REID – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

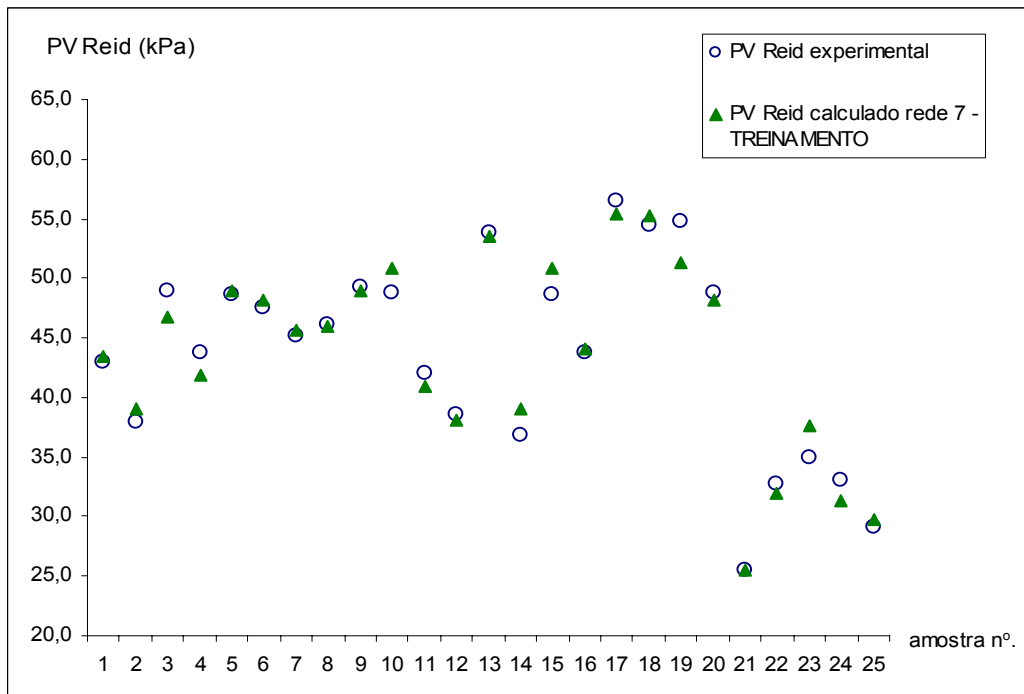


FIGURA 2.4 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA PV REID – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

TABELA 2.9 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PIE - DADOS DE TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

PIE experimental (°C)	PIE calculado (°C)	Desvio relativo %
47,7	48,4	-1,40
51,7	52,1	-0,84
44,8	46,1	-3,01
48,2	48,7	-0,95
44,7	46,0	-2,82
44,5	45,2	-1,62
46,4	45,7	1,50
45,1	45,5	-0,90
44,4	44,9	-1,19
44,7	44,1	1,42
48,1	48,7	-1,35
51,4	51,4	-0,01
41,8	42,6	-1,87
52,8	53,1	-0,58
45,8	45,8	-0,03
49,5	50,1	-1,15
43,4	43,4	0,10
43,4	44,9	-3,55
42,1	42,8	-1,69
45,3	45,1	0,52
65,2	65,5	-0,50
57,7	58,3	-1,08
54,5	54,8	-0,60
56,5	56,8	-0,59
61,4	62,0	-0,95

TABELA 2.10 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PIE - DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

PIE experimental (°C)	PIE calculado (°C)	Desvio relativo %
44,9	46,5	-3,53
49,1	48,4	1,41
44,9	45,4	-1,08
58,4	57,3	1,84
43,5	43,9	-0,83
44,4	45,3	-2,14
45,2	45,5	-0,73
42,9	41,8	2,52
50,4	50,3	0,18
45,3	45,3	-0,09

TABELA 2.11 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PIE - DADOS DE TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

PIE experimental (°C)	PIE calculado (°C)	Desvio relativo %
47,7	48,9	-2,50
51,7	51,1	1,10
44,8	45,2	-0,86
48,2	48,3	-0,29
44,7	45,8	-2,44
44,5	45,7	-2,62
46,4	46,2	0,38
45,1	45,6	-1,11
44,4	45,7	-2,99
44,7	45,5	-1,78
48,1	50,2	-4,33
51,4	52,3	-1,84
41,8	42,2	-1,05
52,8	52,7	0,27
45,8	45,5	0,73
49,5	49,7	-0,48
43,4	44,1	-1,69
43,4	43,1	0,65
42,1	43,8	-4,07
45,3	45,7	-0,89
65,2	65,1	0,14
57,7	58,4	-1,18
54,5	56,7	-4,05
56,5	55,7	1,50
61,4	61,2	0,30

TABELA 2.12 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PIE - DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

PIE experimental (°C)	PIE calculado (°C)	Desvio relativo %
44,9	44,6	0,75
49,1	48,9	0,43
44,9	45,4	-1,14
58,4	59,2	-1,38
43,5	43,0	1,04
44,4	44,8	-0,84
45,2	47,0	-4,01
42,9	43,3	-1,02
50,4	49,6	1,52
45,3	44,8	1,14

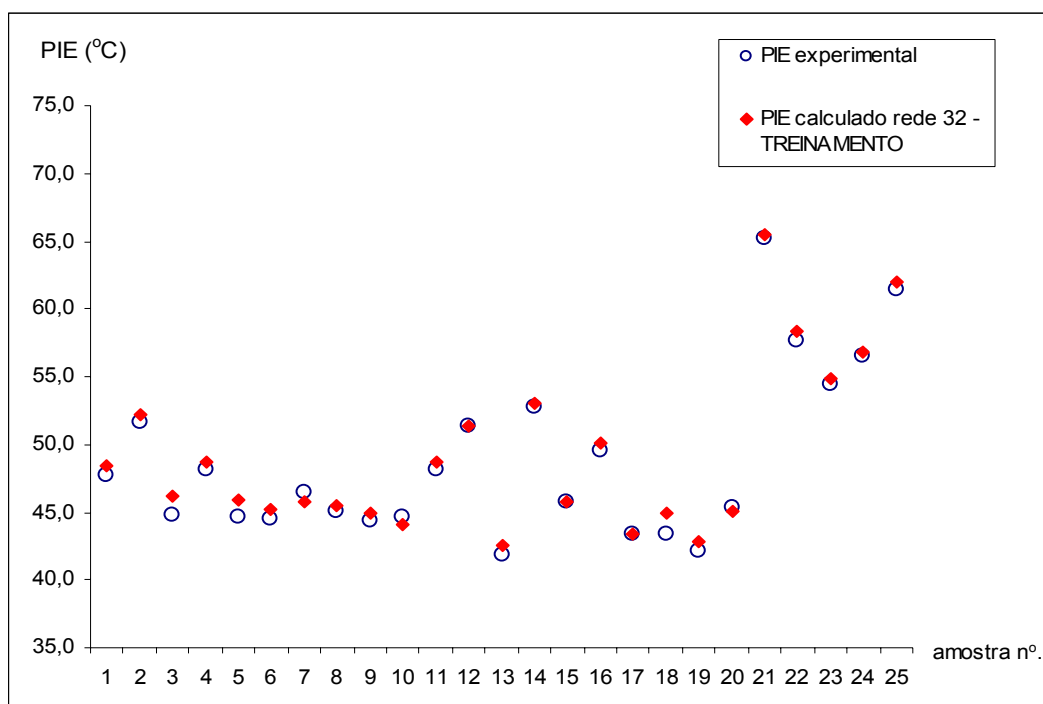


FIGURA 2.5 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA PIE – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

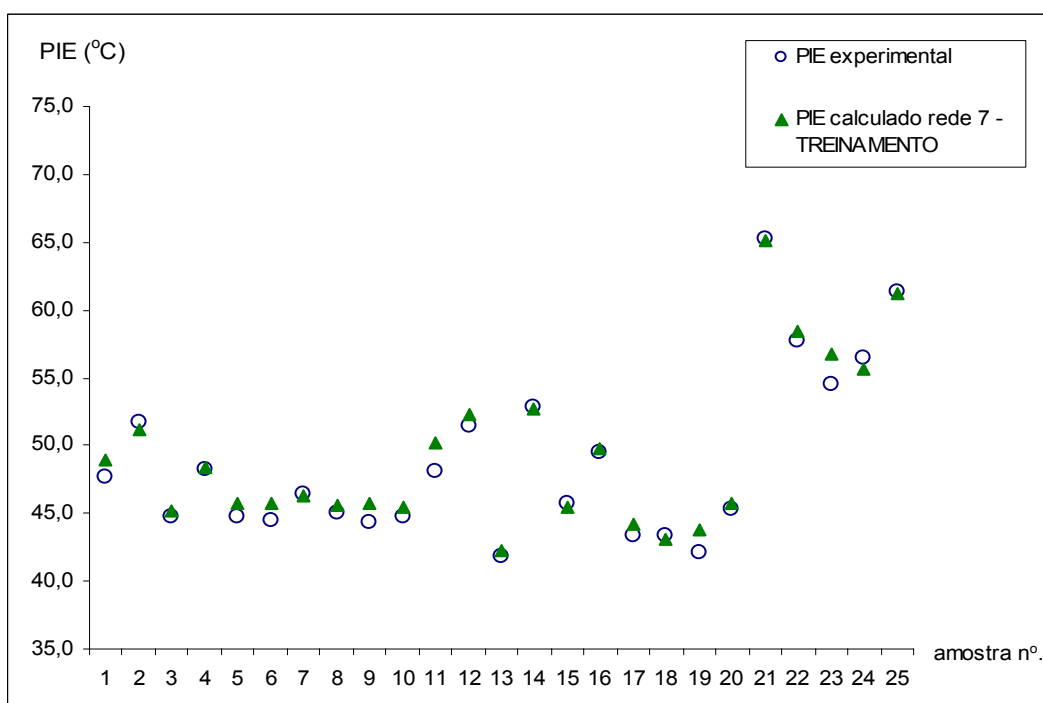


FIGURA 2.6 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA PIE – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

TABELA 2.13 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{10} - DADOS DE TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

T_{10} experimental (°C)	T_{10} calculado (°C)	Desvio relativo %
61,3	64,1	-4,49
64,0	65,0	-1,53
57,5	57,9	-0,62
59,3	60,7	-2,29
57,7	58,4	-1,20
58,0	58,2	-0,39
59,1	59,6	-0,82
59,7	59,0	1,20
57,7	58,3	-1,07
57,0	57,7	-1,20
60,3	60,8	-0,77
63,7	63,2	0,84
55,3	57,0	-3,11
63,7	63,5	0,24
57,5	58,7	-2,10
63,9	66,5	-4,12
53,6	53,9	-0,61
54,6	56,1	-2,74
56,2	56,6	-0,67
57,2	58,7	-2,63
71,3	70,4	1,21
64,8	65,2	-0,64
65,2	67,5	-3,51
64,6	65,6	-1,60
68,0	67,8	0,28

TABELA 2.14 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{10} - DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

T_{10} experimental (°C)	T_{10} calculado (°C)	Desvio relativo %
59,4	60,3	-1,52
60,8	60,7	0,17
58,4	57,4	1,71
66,4	65,7	1,02
54,5	54,7	-0,41
58,0	58,1	-0,22
59,2	59,6	-0,62
56,2	55,5	1,16
62,0	62,9	-1,53
57,2	57,9	-1,30

TABELA 2.15 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{10} - DADOS DE TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

T_{10} experimental (°C)	T_{10} calculado (°C)	Desvio relativo %
61,3	61,3	0,08
64,0	63,8	0,37
57,5	58,8	-2,32
59,3	59,5	-0,31
57,7	58,6	-1,56
58,0	57,9	0,22
59,1	58,9	0,38
59,7	59,5	0,36
57,7	57,4	0,57
57,0	56,7	0,53
60,3	61,1	-1,37
63,7	62,5	1,93
55,3	55,0	0,58
63,7	62,8	1,47
57,5	56,2	2,34
63,9	63,7	0,35
53,6	53,9	-0,53
54,6	54,6	0,04
56,2	57,1	-1,54
57,2	58,0	-1,47
71,3	71,1	0,34
64,8	65,1	-0,49
65,2	65,0	0,25
64,6	65,0	-0,54
68,0	67,5	0,72

TABELA 2.16 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{10} - DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

T_{10} experimental (°C)	T_{10} calculado (°C)	Desvio relativo %
59,4	60,2	-1,28
60,8	61,1	-0,49
58,4	58,9	-0,89
66,4	65,8	0,89
54,5	53,9	1,13
58,0	58,2	-0,28
59,2	59,1	0,16
56,2	55,4	1,48
62,0	61,8	0,36
57,2	58,1	-1,61

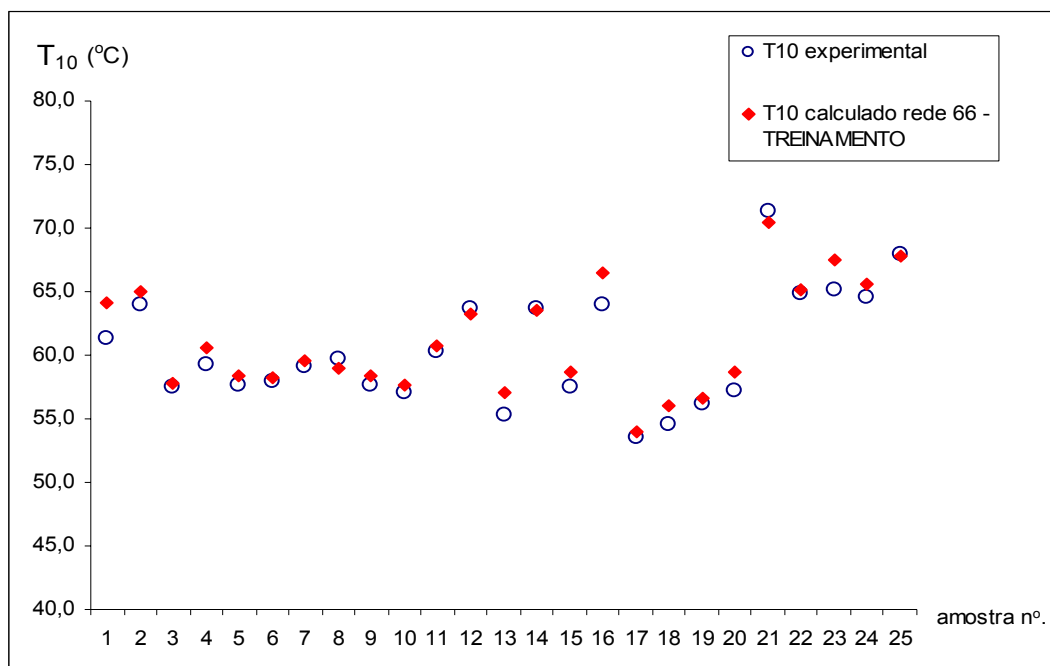


FIGURA 2.7 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA T_{10} – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

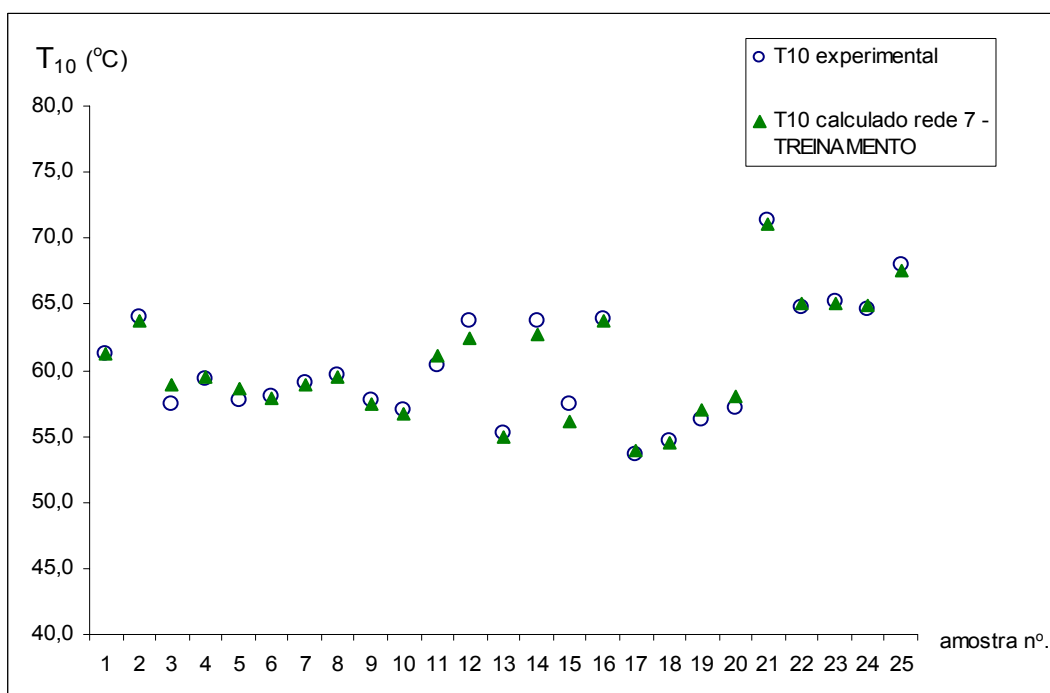


FIGURA 2.8 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA T_{10} – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

TABELA 2.17 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{50} - DADOS DE TREINAMENTO - REDE COMPLEXA.

T_{50} experimental (°C)	T_{50} calculado (°C)	Desvio relativo %
74,6	74,8	-0,30
74,5	74,6	-0,14
73,5	73,9	-0,50
73,2	73,4	-0,30
73,9	74,2	-0,37
73,7	73,8	-0,16
74,0	73,8	0,25
75,4	75,4	-0,01
73,7	73,4	0,34
73,8	73,9	-0,12
74,0	73,9	0,13
74,9	75,1	-0,21
74,2	74,4	-0,21
73,6	73,7	-0,15
73,4	73,4	-0,04
73,6	73,7	-0,19
66,8	66,9	-0,11
69,8	69,9	-0,12
73,5	73,6	-0,17
73,8	73,9	-0,13
78,1	78,2	-0,14
72,3	72,4	-0,14
74,0	74,2	-0,21
74,0	74,2	-0,22
73,8	73,9	-0,15

TABELA 2.18 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{50} - DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

T_{50} experimental (°C)	T_{50} calculado (°C)	Desvio relativo %
74,2	74,3	-0,16
74,0	73,4	0,77
73,8	73,7	0,13
73,6	73,4	0,22
68,1	67,9	0,24
73,6	73,9	-0,40
74,6	74,1	0,70
74,7	75,2	-0,69
74,3	74,8	-0,63
73,5	73,8	-0,37

TABELA 2.19 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{50} - DADOS DE TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

T_{50} experimental (°C)	T_{50} calculado (°C)	Desvio relativo %
74,6	74,4	0,23
74,5	74,9	-0,49
73,5	73,2	0,34
73,2	73,3	-0,10
73,9	73,3	0,77
73,7	73,4	0,39
74,0	74,2	-0,21
75,4	75,3	0,19
73,7	73,5	0,25
73,8	73,4	0,58
74,0	74,6	-0,83
74,9	74,4	0,68
74,2	74,3	-0,16
73,6	74,0	-0,58
73,4	73,6	-0,21
73,6	72,8	1,09
66,8	67,5	-1,11
69,8	70,4	-0,81
73,5	73,0	0,73
73,8	74,3	-0,69
78,1	77,8	0,33
72,3	72,8	-0,74
74,0	73,4	0,83
74,0	74,4	-0,51
73,8	73,7	0,11

TABELA 2.20 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{50} - DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

T_{50} experimental (°C)	T_{50} calculado (°C)	Desvio relativo %
74,2	74,4	-0,29
74,0	73,9	0,08
73,8	73,5	0,36
73,6	73,4	0,24
68,1	68,1	0,07
73,6	73,3	0,37
74,6	75,2	-0,85
74,7	74,5	0,33
74,3	74,1	0,28
73,5	73,3	0,29

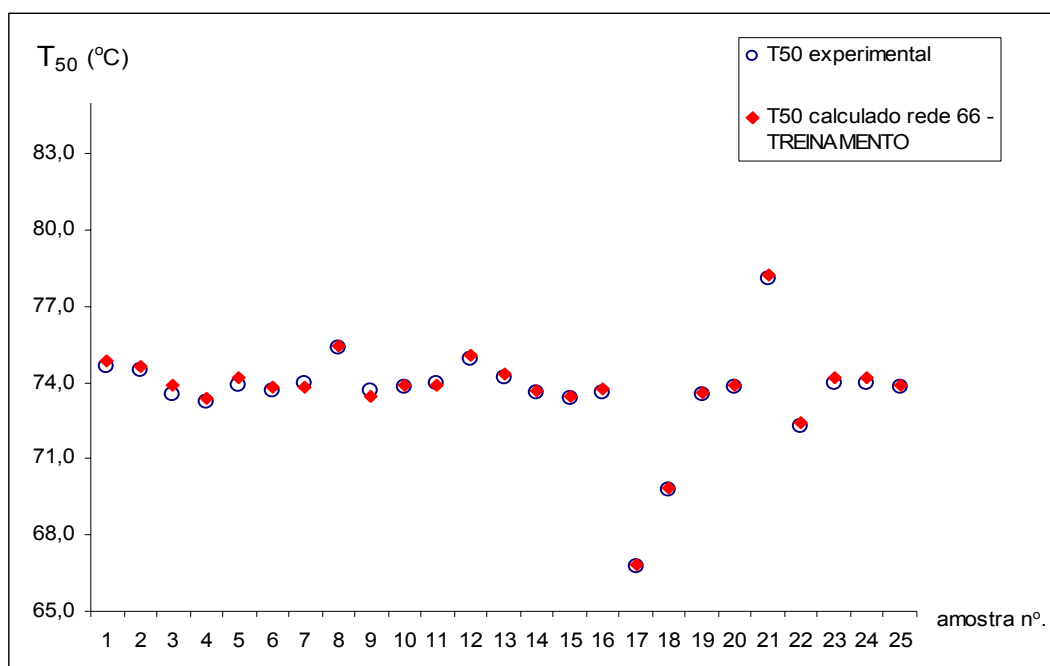


FIGURA 2.9 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA T_{50} – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

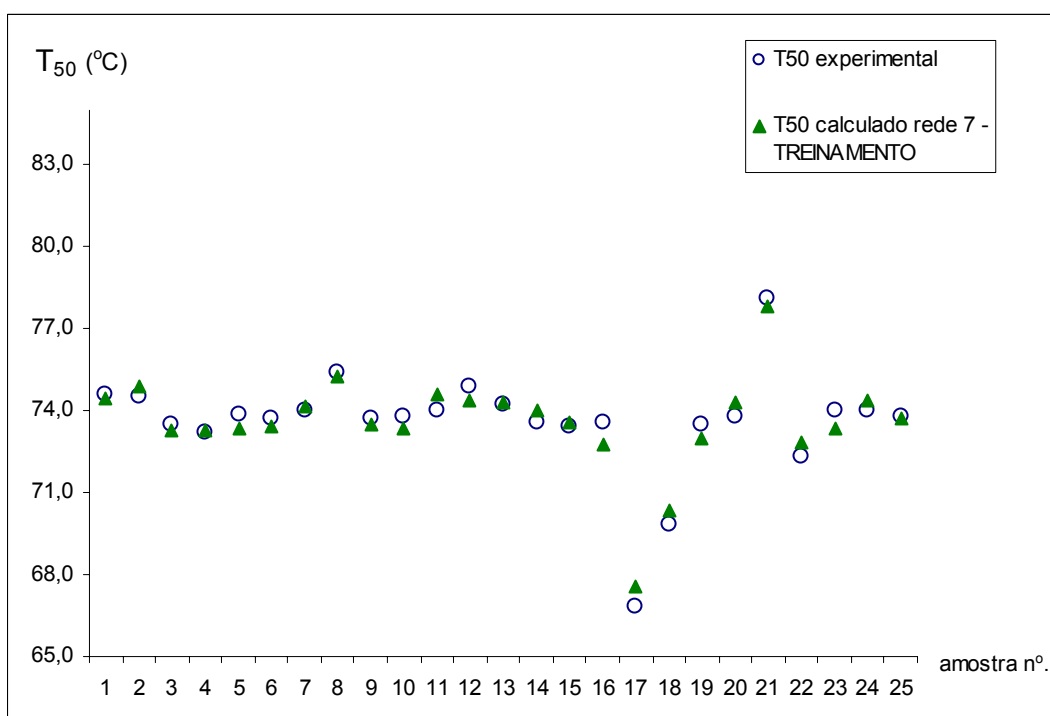


FIGURA 2.10 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA T_{50} – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

TABELA 2.21 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{90} - DADOS DE TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

T_{90} experimental (°C)	T_{90} calculada (°C)	Desvio relativo %
194,8	191,3	1,78
203,2	200,3	1,41
176,7	177,4	-0,38
192,8	192,9	-0,07
171,0	174,3	-1,95
173,9	172,7	0,72
187,4	191,2	-2,05
162,8	164,7	-1,19
175,5	172,1	1,91
176,7	170,6	3,45
187,5	187,0	0,25
194,8	196,6	-0,93
180,2	180,5	-0,17
197,3	197,6	-0,15
170,1	166,0	2,42
160,9	162,6	-1,08
75,0	74,6	0,60
139,8	143,3	-2,53
170,2	173,1	-1,71
171,0	170,4	0,34
136,0	136,0	-0,03
174,5	173,9	0,32
181,3	187,3	-3,33
187,8	186,4	0,74
170,5	168,6	1,13

TABELA 2.22 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{90} - DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

T_{90} experimental (°C)	T_{90} calculada (°C)	Desvio relativo %
185,8	193,1	-3,92
186,8	190,9	-2,19
177,3	177,5	-0,14
187,8	192,6	-2,55
118,2	117,4	0,69
176,6	173,7	1,63
166,1	169,8	-2,21
177,1	182,1	-2,82
183,7	182,2	0,81
174,2	173,8	0,24

TABELA 2.23 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{90} - DADOS DE TREINAMENTO REDE SIMPLES.

T_{90} experimental (°C)	T_{90} calculada (°C)	Desvio relativo %
194,8	201,5	-3,44
203,2	192,3	5,35
176,7	175,9	0,48
192,8	181,1	6,06
171,0	175,7	-2,75
173,9	172,8	0,63
187,4	187,0	0,19
162,8	159,3	2,13
175,5	172,0	2,02
176,7	170,9	3,28
187,5	189,9	-1,29
194,8	192,5	1,17
180,2	180,6	-0,20
197,3	185,8	5,84
170,1	172,3	-1,30
160,9	137,4	14,59
75,0	78,8	-5,10
139,8	155,4	-11,15
170,2	174,7	-2,64
171,0	181,7	-6,23
136,0	145,6	-7,08
174,5	176,7	-1,26
181,3	189,6	-4,58
187,8	193,0	-2,74
170,5	171,2	-0,43

TABELA 2.24 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA T_{90} - DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

T_{90} experimental (°C)	T_{90} calculada (°C)	Desvio relativo %
185,8	185,0	0,44
186,8	182,0	2,55
177,3	174,9	1,35
187,8	191,8	-2,13
118,2	112,2	5,08
176,6	175,4	0,68
166,1	168,1	-1,20
177,1	177,9	-0,44
183,7	189,1	-2,97
174,2	174,8	-0,35

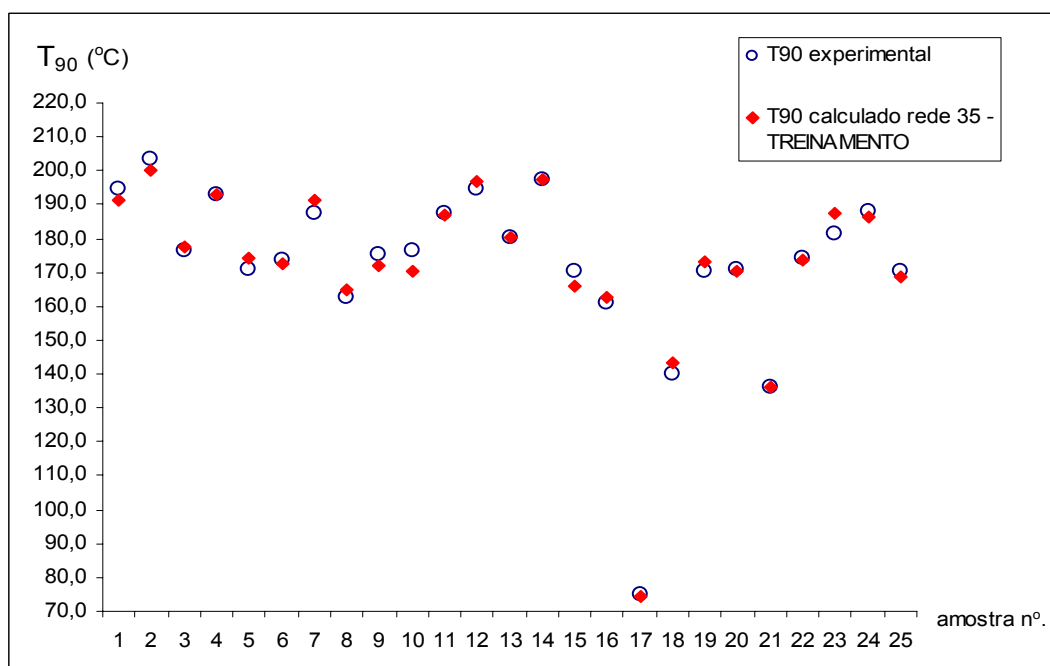


FIGURA 2.11 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA T_{90} – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

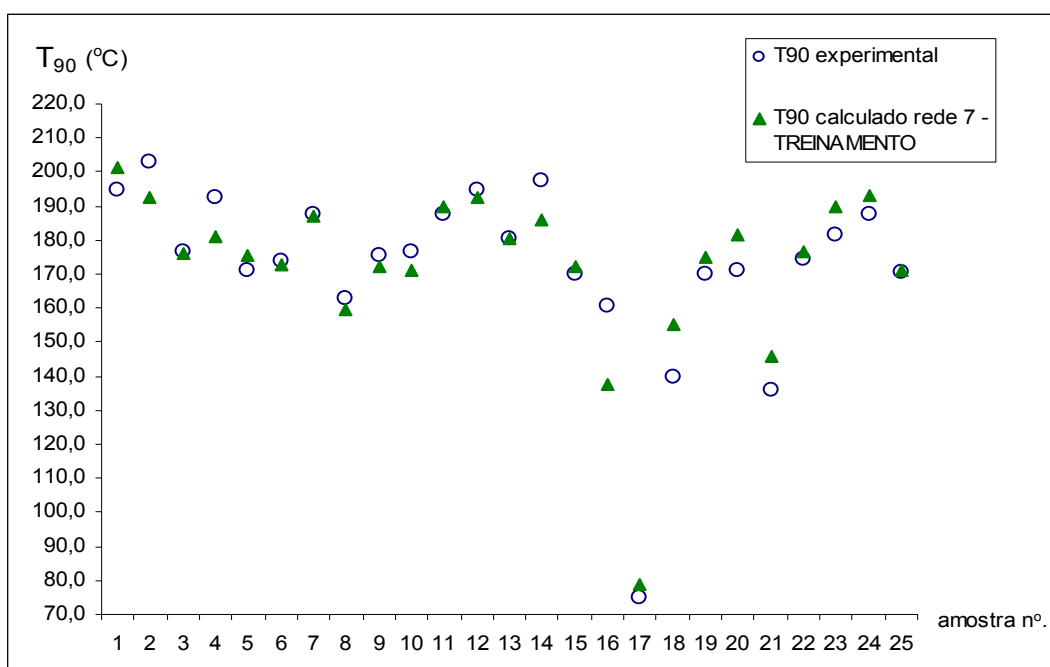


FIGURA 2.12 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA T_{50} – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

TABELA 2.25 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PFE - DADOS DE TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

PFE experimental (°C)	PFE calculado (°C)	Desvio relativo %
238,0	239,2	-0,49
241,9	243,7	-0,75
216,3	218,3	-0,93
233,8	230,3	1,48
214,6	214,8	-0,09
215,8	214,8	0,45
228,2	229,5	-0,56
211,5	204,6	3,27
216,2	215,4	0,37
224,7	215,4	4,12
234,7	235,4	-0,32
242,4	234,2	3,40
219,4	214,5	2,23
243,9	243,0	0,38
220,3	210,7	4,34
230,3	209,9	8,85
177,1	182,1	-2,83
200,2	195,6	2,31
216,5	212,9	1,66
212,7	209,6	1,46
179,9	184,8	-2,74
211,7	212,2	-0,23
220,5	222,7	-0,98
238,2	234,9	1,40
210,5	212,4	-0,89

TABELA 2.26 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PFE - DADOS DE TESTE – REDE COMPLEXA.

PFE experimental (°C)	PFE calculado (°C)	Desvio relativo %
219,5	225,2	-2,60
232,7	228,1	1,99
217,3	216,0	0,61
243,6	234,5	3,75
196,0	190,2	2,94
219,1	214,1	2,27
212,3	209,6	1,27
215,7	220,4	-2,20
226,1	223,1	1,34
219,2	213,5	2,59

TABELA 2.27 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PFE - DADOS DE TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

PFE experimental (°C)	PFE calculado (°C)	Desvio relativo %
238,0	219,3	7,87
241,9	236,5	2,22
216,3	216,1	0,10
233,8	224,1	4,16
214,6	218,6	-1,88
215,8	214,4	0,63
228,2	226,0	0,95
211,5	207,8	1,74
216,2	214,3	0,87
224,7	231,6	-3,09
234,7	234,2	0,20
242,4	237,1	2,19
219,4	208,2	5,11
243,9	236,9	2,86
220,3	214,7	2,55
230,3	230,3	-0,01
177,1	187,9	-6,09
200,2	202,1	-0,95
216,5	209,1	3,41
212,7	216,4	-1,72
179,9	195,4	-8,60
211,7	210,8	0,42
220,5	222,6	-0,97
238,2	244,0	-2,43
210,5	207,0	1,64

TABELA 2.28 - DESVIOS DE PREVISÃO PARA PFE - DADOS DE TESTE – REDE SIMPLES.

PFE experimental (°C)	PFE calculado (°C)	Desvio relativo %
219,5	217,9	0,73
232,7	227,2	2,38
217,3	215,1	1,00
243,6	237,9	2,35
196,0	192,1	1,98
219,1	216,4	1,23
212,3	214,0	-0,79
215,7	214,8	0,43
226,1	236,1	-4,41
219,2	215,5	1,68

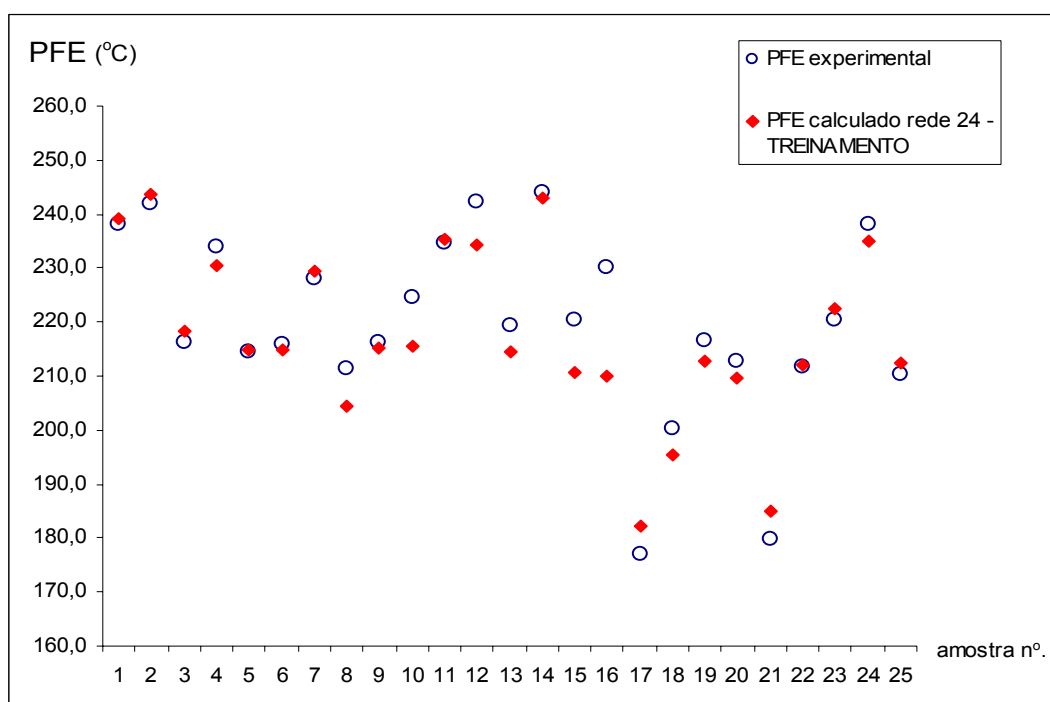


FIGURA 2.13 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA PFE – TREINAMENTO – REDE COMPLEXA.

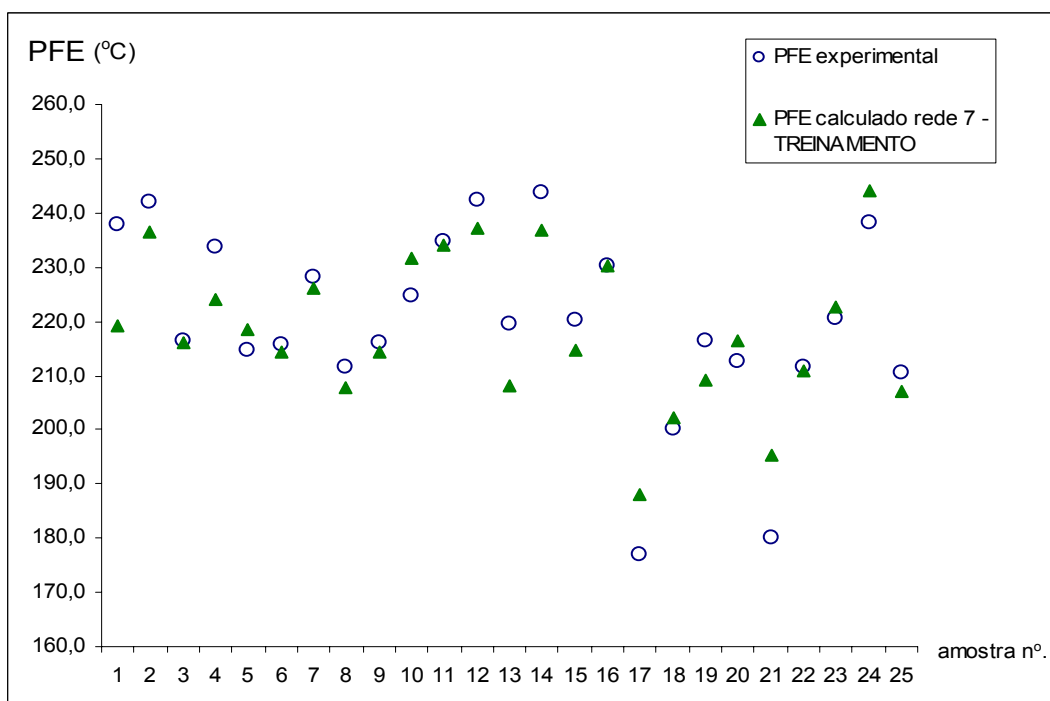


FIGURA 2.14 - PONTO EXPERIMENTAL X CALCULADO PARA PFE – TREINAMENTO – REDE SIMPLES.

APÊNDICE 3 – ARQUITETURAS DAS MELHORES REDES OBTIDAS

TABELA 3.1 - DENSIDADE – REDE COMPLEXA.

continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL						
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7
AC6	-0,5009	0,5058	-0,3417	0,3542	-0,1109	0,1301	1,0226
AC7	-0,4868	-0,8863	-0,5575	-0,2075	-0,4548	-0,5552	-0,4999
AC8	0,4785	0,0905	-0,0096	0,7553	-0,9452	-0,8829	0,6372
AC9	-0,6050	0,1102	-0,9943	-0,1073	0,3436	-0,6418	-0,8354
AC10	-0,4630	-0,5797	0,8670	0,1167	0,5024	-0,3608	-0,5524
AC11	0,7746	0,9874	-0,5214	-0,0180	-0,0407	0,4505	0,5562
AC12	0,0088	0,2042	0,4905	-0,7368	-0,8411	-1,0576	-0,0549
AC13	0,7062	-0,0283	-0,2047	-0,8293	-0,1271	-0,8465	0,5638
AC14	0,0822	-0,0088	0,5911	0,2104	-0,2981	0,2750	0,4436
AC15	-0,3746	-0,2222	0,5345	-0,0542	0,9180	-0,0916	-0,5111
C14	0,6986	0,4146	-0,6253	-0,1032	-0,0206	0,3613	0,1877
C15	0,2004	-1,1344	0,8611	-0,9694	-0,8761	-0,9048	0,0468
IC5	0,5765	0,2489	-0,7085	-0,5667	0,7647	-0,3461	0,8757
IC6	-0,7776	1,2152	0,2950	-0,2687	-0,0825	0,2511	-0,5227
IC7	0,3343	-1,0351	-0,2957	-0,4325	-0,9504	-0,1551	0,2578
IC8	0,3297	0,8018	-0,5997	-0,5423	-0,7401	0,4251	-0,5980
IC9	0,9970	-0,7630	0,8624	-0,2417	0,2527	0,5747	0,2450
IC10	0,8476	0,4089	0,6802	0,4397	-1,1740	-0,4967	-0,0775
IC11	0,3218	0,5361	-0,4209	0,2979	-0,4110	-0,6517	-1,0266
IC12	-0,8149	-0,6021	0,5683	-0,4914	-0,2128	-0,2065	-0,1683
NC5	-0,1567	0,3359	0,5307	-0,1375	-0,6736	-0,1023	-0,0279
NC6	-0,3623	-0,0578	0,7986	0,0303	-0,9824	0,8662	-0,9216
NC7	0,8781	-0,5578	-0,4043	-0,8724	-0,5734	-0,3230	-0,5085
NC8	0,9949	0,7855	0,3575	-0,4638	0,4888	0,1708	0,3110
NC9	0,4925	-0,6268	0,0374	-0,9059	0,3869	-0,8300	-0,1664
NC10	0,6514	0,1416	-0,8712	0,9910	0,2640	0,4825	-0,7168
NC12	0,9854	0,3800	0,3404	0,9419	-0,9135	-0,6471	-0,8114
OLC4	-0,4657	0,6537	-0,0056	1,0098	0,1459	0,3554	-1,2592
OLC5	0,5238	-0,8389	-0,9511	-0,6022	-1,2355	-0,8112	-0,8840
OLC6	0,7074	0,4048	0,4458	0,8213	0,6284	0,3522	-0,7652
OLC7	-0,1451	-0,0090	-0,7991	0,3940	0,2381	1,0057	-0,6537
OLC8	-0,4130	-0,5436	0,2296	-0,7350	-0,0831	-0,5125	0,1260
OLC9	-0,9090	0,7615	0,6867	0,8168	-0,6415	-0,5632	-0,1338
OLC10	0,8841	-0,6761	0,5371	0,2743	0,3929	1,0487	-0,3225
OLC11	0,0079	-0,0782	-0,2737	-0,5658	0,4395	-0,0448	0,3037
OLC12	0,3794	-1,0688	0,9546	1,1817	0,6137	0,4907	-0,3050
OLC13	0,9429	0,4948	-0,8925	-0,8264	0,3295	-0,3150	-0,1485
OLC14	0,0682	0,0388	-0,9655	0,7719	0,2421	-0,2103	-0,5809
OLC15	1,0443	0,8603	0,8016	0,6408	0,0754	0,1431	-0,6667
OLC16	0,8322	-2,1704	2,2331	1,8212	-0,1225	-1,8832	2,4364

TABELA 3.1 - DENSIDADE – REDE COMPLEXA.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							conclusão
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	
OX2	0,5089	-0,8634	0,1773	0,7100	-0,0154	-0,3043	-1,1094	
OX3	-0,7891	-0,1287	0,7162	-0,2168	-0,5635	0,7181	0,2073	
OX4	0,0131	-0,4669	-0,4533	0,3287	0,2900	0,7762	0,2556	
PC3	0,0183	-0,1895	0,9172	-0,0584	0,7512	-0,1365	0,2970	
PC4	-0,8310	1,2260	0,4540	0,1813	0,7453	1,2297	-0,2602	
PC5	-0,0015	0,2186	-0,0673	0,6798	0,7426	-0,0021	-0,2014	
PC6	0,0415	-0,1714	-0,1455	-0,3555	-0,2281	0,5780	-0,0687	
PC7	1,0573	0,6876	-0,0154	0,9001	-0,6781	1,1792	-0,1947	
PC8	0,0997	-0,0559	0,7824	0,0683	-0,2005	0,7136	0,7423	
PC9	0,5963	-0,1693	-0,5351	0,3959	-0,7360	-0,6855	-0,6401	
PC10	-0,7354	0,1076	-0,7089	-0,3353	0,1986	-0,1999	-0,1838	
PC11	-0,3476	-0,3116	0,6172	-0,8207	-0,3102	0,0447	0,8583	
PC12	0,9036	0,7135	0,5472	-0,9186	0,8294	0,2250	0,1764	
PC13	-0,4910	0,0100	-0,1732	-0,0799	0,1219	0,6943	0,4472	
PC14	-0,6181	-0,1871	-0,4702	-0,7759	-0,1480	0,4047	0,8831	
PC15	-0,9009	0,1105	0,4246	-0,7386	-1,0884	-0,4692	-0,8517	
PC16	6,7680	-2,3261	-7,2945	-13,9251	4,9394	-4,4760	10,2181	
DC5	0,8550	0,5824	0,2448	0,4134	0,7485	-0,6169	-0,2761	
DC6	0,0034	0,3812	0,6489	-0,8513	0,8287	-0,0923	0,7579	
DC7	0,7490	0,9995	-0,5748	-0,9343	0,3482	-0,1115	-0,1859	
DC8	-0,5227	1,0235	0,3449	0,2851	-0,1319	-0,6511	-0,9785	
DC9	0,2820	-0,1527	-0,4545	0,2979	0,7937	1,0321	0,0275	
DC10	0,0646	0,5162	-0,2630	-0,2177	-0,0540	0,2502	0,2978	
DC11	-0,4366	-0,4773	-0,0866	0,2711	-1,2199	0,8486	0,4967	
DC12	0,7192	-0,0686	-0,7025	-0,4488	-0,3326	-0,0056	0,7781	
DC13	-0,2800	0,2754	-0,7776	0,1736	0,5598	-0,9360	-1,1101	
Bias de entrada	-1,8153	-1,9081	-1,8391	4,8119	-2,5956	1,4192	1,4013	
Saída cam. oculta	-0,0595	-0,6232	-0,3522	-0,0752	-0,3690	-0,2950	-0,5167	
Bias oculto	0,0053	-	-	-	-	-	-	

TABELA 3.2 - DENSIDADE – REDE SIMPLES.

continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL				
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5
Aromáticos	-1,0264	4,3314	-3,9383	1,7361	-1,4861
Isoparafinas	-0,0522	-0,6110	0,5212	3,7630	-2,4730
Naftênicos	-4,0537	-2,0965	1,2258	1,0989	-3,1990
Olefinas	1,2508	-1,5562	0,0558	2,6329	-2,7261
Oxigenados	1,3961	1,9814	-4,0968	-2,1414	-0,6863
Parafinas	-4,7377	3,5295	2,6178	-1,5849	1,1364
Desconhecidos	-0,1584	-0,7106	-0,2320	3,3686	-3,1777
Bias de entrada	5,4436	-3,5836	3,3442	-4,7770	7,5414
Camada oculta	-0,1582	0,1613	-0,4276	0,2705	0,8756
Bias oculto	0,0111	-	-	-	-

TABELA 3.2 - DENSIDADE – REDE SIMPLES.

conclusão

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL				
	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8	Neurônio 9	Neurônio 10
Aromáticos	2,5197	-1,5220	1,5651	-3,8298	-1,1732
Isoparafinas	2,6508	2,3178	2,6814	2,8437	1,3159
Naftênicos	-2,7444	-2,1540	-1,0377	-0,1857	3,2319
Olefinas	2,4855	4,2225	0,8675	-4,0832	2,3946
Oxigenados	-2,1988	3,0337	3,2299	-0,4512	3,4910
Parafinas	3,1630	1,2905	-2,7102	-1,2630	-2,4668
Desconhecidos	-1,0825	0,9966	-3,5586	0,9731	-2,0457
Bias de entrada	-1,5406	-4,7804	-0,4695	1,5771	-4,5849
Camada oculta	-0,2277	-0,0605	-0,1804	-0,1472	-0,4190
Bias oculto	-	-	-	-	-

TABELA 3.3 - PV REID – REDE COMPLEXA.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL		
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3
AC6	-0,5925	-1,1231	-0,4087
AC7	0,4402	0,2833	0,4412
AC8	-0,2889	-0,1158	0,1090
AC9	0,4122	-0,5104	0,7301
IC5	0,2852	-0,1266	-0,6148
IC6	-0,2658	0,3041	-0,1908
IC7	0,2910	-0,9945	0,1727
IC8	0,7215	0,5155	1,1027
NC5	-0,9523	0,6692	0,2578
NC6	-0,6230	0,1016	-0,6428
NC7	0,1715	-0,8626	0,0124
OLC4	-0,0473	-0,7397	-1,3801
OLC5	-0,6896	-0,5366	0,2596
OLC6	1,0190	0,1162	0,7696
OLC7	0,5292	-0,6707	0,0077
OLC8	0,9737	-0,7993	-0,0094
OLC9	-0,3779	0,4135	-0,0768
OX2	0,8661	-0,4609	0,2794
OX3	-0,4069	0,0950	0,1503
OX4	0,4692	-0,5254	0,2455
PC3	0,6870	-0,1473	-0,1959
PC4	1,0680	0,4430	-0,5209
PC5	-0,1183	0,2489	-0,2393
PC6	-0,4013	0,9152	-0,4485
PC7	-1,0133	-0,3919	0,2862
PC8	-0,1618	-0,5000	0,0159
PC9	0,7853	0,0183	-0,1920
DC5	-0,8097	0,1339	-0,1324
DC6	-0,7962	-0,9432	0,1864
DC7	0,6540	0,0790	-0,0740
DC8	0,9814	0,0664	0,2562
DC9	0,0439	1,3138	-0,2916
Bias de entrada	0,9088	-0,3786	0,8972
Saída cam. oculta	0,1888	-0,5371	-1,3827
Bias oculto	-0,1871	-	-

TABELA 3.4 - PV REID – REDE SIMPLES.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8
Aromáticos	4,9648	2,2340	1,7090	-1,7885	-2,8164	-2,1489	-0,4060	-1,1688
Isoparafinas	3,0404	-2,7516	-6,3000	3,5728	0,7356	-4,1572	-0,0289	5,1478
Naftênicos	-0,7515	4,5864	-0,1340	2,6220	5,1955	-1,3198	1,4638	-0,0633
Olefinas	5,2861	-0,6392	3,1776	2,7913	3,5472	-4,5979	-5,0128	-0,3196
Oxigenados	-3,7030	-7,4222	4,0667	-5,8951	-1,9355	-1,5118	3,4911	-6,6863
Parafinas	-0,3078	1,7883	-1,7622	-4,1558	4,1318	4,5358	4,7221	-1,5603
Desconhecidos	2,5912	-0,1183	-4,0203	-2,5615	-4,5899	-4,6968	5,1622	3,7217
Bias de entrada	-8,5347	-1,3369	0,7076	2,6460	-1,4313	6,0258	-6,2219	-1,7787
Camada oculta	0,2471	-0,6610	0,0294	0,0726	0,1247	-0,0192	-0,3361	-0,4137
Bias oculto	-0,3850	-	-	-	-	-	-	-

TABELA 3.5 – CURVA DE DESTILAÇÃO (PIE) – REDE COMPLEXA.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL					
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6
AC6	0,3909	-0,6746	-0,1292	0,5351	-0,0556	-0,9835
AC7	0,4059	-0,4317	0,1386	-0,9097	0,3879	-0,7792
AC8	-0,7679	0,1276	0,5125	-0,9225	-0,8463	-0,9389
AC9	-0,5166	-0,3455	0,8097	0,5970	0,9174	0,5543
IC5	-0,0576	0,4028	-0,6669	-0,5234	-0,8979	0,4652
IC6	-0,4727	-0,5038	0,1086	0,7093	-0,8967	0,0456
IC7	0,8483	0,5264	-0,9785	-0,8515	-0,5532	-0,8532
IC8	-0,4134	-0,8606	0,9138	0,7538	0,5241	0,0936
NC5	0,7534	-0,7677	-0,4106	0,9507	0,6069	0,6083
NC6	-0,1572	-0,8938	-0,9174	-0,6478	-0,3383	-0,6917
NC7	-0,7415	-0,9939	-0,2258	-1,0138	0,1177	0,8911
OLC4	-0,7692	1,0928	0,0554	0,4444	-0,0907	-0,3360
OLC5	0,4639	-0,0228	0,3915	-0,6449	0,8392	0,7691
OLC6	0,1764	0,0677	0,7097	-0,1067	-0,4260	-0,0648
OLC7	-0,4722	-0,7697	-0,1950	0,7612	0,4594	-0,8353
OLC8	0,4337	-0,3338	-0,9610	-0,7141	0,4210	-0,5035
OLC9	0,5520	0,7544	-0,7758	-0,4153	-0,3819	0,3201
OX2	-0,0871	-0,2375	-0,2287	0,0054	-0,4420	-0,5641
OX3	0,5760	-0,5810	0,7995	1,0804	-0,3896	-0,7163
OX4	0,7838	0,5247	0,0198	0,0362	0,3464	-0,0137
PC3	-0,4722	0,6106	-0,6145	-0,6818	0,9541	-0,5877
PC4	-0,7583	-0,3984	0,6556	-0,6307	0,0987	0,7884
PC5	-0,8163	0,1504	-0,8080	1,0532	0,6614	-0,3154
PC6	-0,6589	0,9644	0,1656	-0,0391	0,0846	0,7761
PC7	-0,3829	0,3533	0,0632	-0,7226	1,0141	0,9436
PC8	-0,8586	-0,8870	-0,3774	-0,3422	0,1663	0,2203
PC9	0,0259	-0,5891	-0,8139	-0,0124	-0,5857	0,1632
DC5	-0,0755	0,8870	-0,9918	-0,5796	1,0389	-0,3740
DC6	0,8266	0,2988	0,6058	0,8651	-0,1745	0,5649
DC7	-0,3483	0,5158	-0,5692	-0,8566	0,0908	0,7140
DC8	0,2824	0,1243	0,3965	-0,5161	0,2761	0,3548
DC9	-0,1063	0,2403	0,7648	-0,2921	-0,6671	0,2304
Bias de entrada	0,2643	0,3747	-0,4845	-0,4275	-0,5746	-0,5849
Saída cam. oculta	1,0293	-1,1154	0,8123	-1,0568	-0,6448	0,6388
Bias oculto	-0,0567	-	-	-	-	-

TABELA 3.6 – CURVA DE DESTILAÇÃO (PIE) – REDE SIMPLES.

continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8
Aromáticos	-3,2235	-3,4593	-3,4981	6,0194	2,1234	-4,0782	-2,8143	4,2082
Isoparafinas	3,3120	-3,1765	3,4659	3,4281	-2,1709	0,5854	-4,4065	4,4129
Naftênicos	-5,3016	-2,9712	4,5585	5,9828	-0,2528	-0,2319	-7,7891	-1,1987
Olefinas	1,5952	4,8843	-0,4880	0,2308	2,0930	-3,4938	-2,9409	-4,7445
Oxigenados	3,0707	-1,9440	-5,1677	-2,9757	7,6520	6,4444	-1,6007	-1,6611
Parafinas	4,7066	-6,1914	-4,8955	-3,6187	-3,6715	-4,7709	-2,7770	5,3489
Desconhecidos	4,8641	2,5956	3,3334	0,5841	-4,5270	-3,4501	0,0859	3,2270
Bias de entrada	-2,4477	7,3873	2,7550	-6,3602	-1,5935	5,2350	11,6234	-5,5876
Camada oculta	-0,1289	0,5102	0,0211	0,1798	-0,0869	0,1425	-0,1957	0,5352
Bias oculto	0,5052	-	-	-	-	-	-	-

TABELA 3.6 - CURVA DE DESTILAÇÃO (PIE) – REDE SIMPLES.

conclusão

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							
	Neurônio 9	Neurônio 10	Neurônio 11	Neurônio 12	Neurônio 13	Neurônio 14	Neurônio 15	
Aromáticos	5,0183	-4,0608	5,2715	-7,2481	2,8742	3,7117	-6,1129	
Isoparafinas	0,9738	-4,8866	-4,6121	-3,6733	-1,3774	-3,2217	-2,7115	
Naftênicos	-2,2895	1,7239	-2,3408	-3,5923	-2,7572	-5,4198	-4,2483	
Olefinas	4,9267	5,0242	0,1336	4,7045	5,9621	-2,2536	3,2205	
Oxigenados	-3,9008	-1,5436	-1,1604	-1,2749	6,2673	-1,3651	0,3593	
Parafinas	5,4057	-5,6472	6,2293	1,2160	3,5694	4,5556	-5,7826	
Desconhecidos	-2,6937	1,4596	-3,3939	-1,1770	-1,7679	5,1157	0,3952	
Bias de entrada	-2,9646	3,9033	1,3186	4,6656	-4,3525	0,8507	5,3838	
Camada oculta	-0,0904	0,3361	0,4467	0,1947	-0,0581	-0,2955	0,0020	
Bias oculto	-	-	-	-	-	-	-	

TABELA 3.7 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{10}) - REDE COMPLEXA.

continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8
AC6	-0,8173	-0,8004	-0,7643	-0,4851	0,3473	-0,7167	0,5864	0,6711
AC7	-0,0804	-0,8328	0,4724	-0,1013	-0,3010	-0,9621	-0,5039	0,4534
AC8	0,3052	-0,5935	0,2198	0,9286	0,0212	-0,0301	0,0149	0,6921
AC9	0,8019	0,3137	0,2490	0,3783	-0,2649	-0,8498	0,2788	0,9336
AC10	0,4948	0,4759	0,6986	-0,7306	0,7850	0,5480	0,4560	-0,6775
AC11	-0,1861	0,6330	0,6005	-0,7016	0,3149	0,4900	0,7847	-0,6715
AC12	0,1490	-0,5095	-1,0098	-0,8607	0,8788	0,1844	-0,1384	0,5934
AC13	-0,4040	-0,2303	0,4657	-0,3636	0,1207	0,4028	0,0719	-0,6609
AC14	-0,6449	-0,2964	-0,3374	-0,2435	-0,0599	-0,0341	0,2502	0,5332
AC15	0,4109	-0,8818	0,0347	0,4818	0,0186	-0,6936	-0,5225	-0,1631
C14	0,5279	0,7759	0,8371	-0,0338	0,3049	-0,0272	-0,8477	0,6690
C15	0,2712	-0,0305	0,4187	-0,7168	-0,3752	0,8362	0,8807	0,7145
IC5	-0,6827	0,4957	-0,6199	0,8908	0,6444	0,9182	-0,3356	-0,0746
IC6	-0,7057	0,0769	-0,8489	-0,5274	-0,0773	0,9944	0,1641	-0,4450
IC7	0,0139	0,0648	0,8019	0,1525	0,9290	0,9672	0,2009	0,3390
IC8	0,7872	-0,0713	0,6253	0,7761	0,6684	0,7705	1,0141	0,8878
IC9	0,8061	-0,6639	0,5285	-0,0343	-1,0400	-0,7357	-0,0815	0,8228
IC10	0,7134	0,7026	0,7608	-0,2750	-0,9669	0,6970	0,8317	-0,5897
IC11	-0,2812	-0,7110	-0,5413	-0,5835	-0,5557	-0,5477	0,1375	0,2449
IC12	0,7445	0,4793	-0,7306	-0,3425	-0,8136	0,2062	0,6189	-0,6336
NC5	-0,8325	0,8217	0,1682	-0,9719	0,2694	-0,2224	0,0585	-0,6758
NC6	0,9913	0,6069	-0,3221	0,3844	0,3390	-0,4254	0,9531	0,4762
NC7	-0,3852	0,2110	0,3736	-0,0213	0,3092	0,2456	0,5134	0,1296
NC8	-0,5699	0,7663	-0,5498	0,5621	0,4065	0,7609	0,0800	-0,6816
NC9	0,7013	0,3955	-0,0900	0,7194	-0,2201	-0,1331	0,1638	0,2138
NC10	-0,4429	-0,7732	-0,5895	0,3850	0,3317	0,6329	-0,9354	-0,8028
NC12	0,0062	-0,2708	-0,6334	0,9558	0,7071	0,9768	0,6420	-0,9014
OLC4	-1,0892	-0,0688	0,3886	-0,2378	0,7959	0,8400	-0,1879	-0,8012
OLC5	-0,7046	-1,0674	0,4816	0,2054	0,2178	0,2259	-0,6463	0,9923
OLC6	-1,0063	-0,0228	-0,5595	-0,4268	0,8720	0,4325	-0,3397	-0,8358
OLC7	-0,9753	0,1264	-0,7545	0,9122	-0,9372	0,9689	0,2847	-0,1106
OLC8	0,4477	-0,3932	-0,3012	0,7978	-1,0109	-0,9707	0,0796	0,4450
OLC9	-0,0428	0,5454	-0,6905	-0,5052	-0,6573	-0,7531	-0,9197	-0,4229
OLC10	-0,1887	0,0371	-0,0944	0,6195	-0,1045	-0,4814	0,2568	-0,6863
OLC11	-0,5647	-0,2936	-0,0090	-0,1149	0,0353	-0,4524	0,6122	0,6271
OLC12	-0,3205	0,4751	0,8775	0,7487	0,2582	-0,9818	-0,0906	-0,8417
OLC13	0,6697	-0,4755	-0,3746	-0,2644	0,0482	-0,3359	-0,9510	-0,3115
OLC14	-0,4709	-0,5301	-0,5778	0,7473	-0,5619	0,6541	-0,7671	1,0236
OLC15	0,0797	0,0401	-0,4939	0,4193	-0,0576	0,7003	-0,4408	0,5219
OLC16	-0,2441	-0,4147	-0,8968	0,0812	-0,7117	-0,0905	0,0191	-0,6878

TABELA 3.7 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{10}) - REDE COMPLEXA.

conclusão

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8
OX2	0,3624	-0,3330	0,3705	0,7250	-0,9289	-0,7641	-0,1394	-0,2164
OX3	0,2889	-0,3442	-0,5841	0,0384	-0,8632	-0,6597	-0,9393	-0,0866
OX4	0,4732	0,6798	0,8429	0,5410	-0,4615	-0,5246	-0,0241	-0,0720
PC3	0,0421	-0,0770	0,7145	-0,0485	-0,6486	0,1875	0,9943	0,2809
PC4	-0,6019	0,9527	0,2507	0,2893	-0,4690	-0,8568	-0,2709	-0,1780
PC5	0,4741	0,8466	0,7787	-0,6113	-0,5153	-0,4005	0,6724	0,0170
PC6	-0,9298	0,4506	0,7020	0,3884	0,2310	0,7354	-0,8160	-0,6642
PC7	0,6533	-0,3564	-0,7192	-0,7384	-0,7638	0,6995	-0,8717	-0,1335
PC8	0,5496	0,4115	-0,0503	-0,8362	0,1884	0,5198	0,7061	0,5728
PC9	0,1581	0,6670	0,5213	-0,2667	0,5259	0,2304	-0,8806	-0,2716
PC10	-0,0006	0,3588	0,4020	-0,5609	-0,0301	0,9095	-0,0998	-0,6464
PC11	0,9062	0,1723	0,5880	0,9012	-0,1180	-0,9969	0,9975	-0,1550
PC12	0,8654	0,0453	0,6099	-0,4817	0,2573	-0,5974	-0,8002	0,8596
PC13	0,7284	0,0767	-0,1650	-0,2413	0,2761	-0,8800	-0,1517	0,8736
PC14	-0,6326	0,7387	0,4798	-0,8225	0,1407	-0,4579	0,9671	0,6425
PC15	0,4264	-0,5888	-0,5611	-0,5242	-0,2445	-0,1929	0,7768	-0,7069
PC16	0,2688	-0,4895	0,9316	-0,4346	0,8933	0,6418	0,5191	-0,2726
DC5	-0,5794	0,1002	0,0926	0,6687	0,4122	-0,1952	-0,1534	0,6525
DC6	-0,1640	-0,1217	0,4870	0,2567	0,0947	0,8852	0,1446	0,9764
DC7	-0,0887	0,8150	-0,2202	0,5657	-0,8217	0,7940	0,3985	0,9967
DC8	0,9022	0,7882	-0,4900	-0,1461	0,7183	0,3874	-0,3516	-0,5722
DC9	0,6161	-0,5302	-1,0924	-0,7059	0,8222	0,2027	0,1846	0,9711
DC10	0,1731	-0,4077	0,8807	0,6980	-1,0783	-0,9741	-0,7141	-0,8501
DC11	0,1328	-0,5615	-0,9318	0,1506	0,8569	-0,9858	-0,6685	-0,7970
DC12	-0,8813	0,8611	0,2149	-0,4751	-0,3580	-0,2581	0,9807	-0,9098
DC13	-0,9763	-0,1600	0,3778	-0,0939	0,2101	0,6306	-0,5182	-0,6255
Bias de entrada	-0,0791	-0,5283	0,1080	-0,1001	0,6521	-0,6560	-0,7910	0,1800
Saída cam. oculta	0,1664	-0,0286	-0,0311	-0,0270	0,0100	0,0135	-0,0623	0,0168
Bias oculto	0,4834	-	-	-	-	-	-	-

TABELA 3.8 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{10}) - REDE SIMPLES

continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL					
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6
Aromáticos	2,0377	0,8710	2,0989	-2,7121	-3,7647	-4,6583
Isoparafinas	3,7578	1,9156	-1,3186	-1,1999	-2,9421	-0,9256
Naftênicos	-1,5311	5,0855	2,0210	-3,6356	-1,0496	-0,6222
Olefinas	-1,9172	-1,8061	-3,0191	-3,1142	3,3132	1,4875
Oxigenados	-2,2249	-2,5792	3,0099	1,3391	-2,9397	0,1656
Parafinas	2,4304	1,2633	-1,4433	2,4708	0,1058	2,4862
Desconhecidos	-2,9311	-0,6388	3,3662	1,5296	0,0717	-3,1539
Bias de entrada	-1,1397	-4,4562	-3,9375	3,7699	3,8306	3,0381
Camada oculta	-0,2616	0,4116	-0,8132	0,4235	-0,3295	-0,3644
Bias oculto	0,8784	-	-	-	-	-

TABELA 3.8 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{10}) - REDE SIMPLES.

conclusão

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL				
	Neurônio 7	Neurônio 8	Neurônio 9	Neurônio 10	Neurônio 11
Aromáticos	1,2440	-3,6734	3,3758	-1,0667	-4,4975
Isoparafinas	4,1346	-3,5344	0,6181	-1,2169	-2,7706
Naftênicos	2,6827	1,9864	3,1953	4,0436	-0,3497
Olefinas	-0,2587	-2,2040	3,6042	1,5280	-0,4277
Oxigenados	4,2857	2,9539	-2,1550	-3,9191	0,0740
Parafinas	0,0146	-0,8636	-1,6482	-2,5247	3,8956
Desconhecidos	-0,3987	0,8721	1,2605	-1,2280	1,0951
Bias de entrada	-5,2770	0,7032	-2,8941	0,5002	-0,0997
Camada oculta	0,1686	0,4425	0,3259	0,2839	0,8137
Bias oculto	-	-	-	-	-

TABELA 3.9 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{50}) - REDE COMPLEXA. continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL			
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4
AC6	-0,8970	-0,6152	0,0206	0,6580
AC7	0,0357	-0,5441	-0,0092	0,2105
AC8	0,2145	0,6641	-0,4905	-0,9127
AC9	0,7399	-0,5185	0,0991	1,0157
AC10	0,0033	0,2278	-0,2867	-0,5196
AC11	-0,0886	-0,8733	-1,0061	0,6926
AC12	-0,1738	-0,0375	0,6702	0,4207
AC13	-0,0085	0,6576	0,0775	0,5576
AC14	-0,5006	0,6064	0,6189	0,3244
AC15	-0,2021	-0,9467	0,7132	-0,8655
C14	-0,7335	-0,9108	-0,9893	-0,4623
C15	-0,1679	-0,6351	-0,2694	-0,1654
IC5	-0,3121	0,4814	-0,9758	0,0193
IC6	-0,0792	-0,4875	0,3889	-0,3939
IC7	0,2626	0,0829	1,0598	-0,2511
IC8	-0,0970	-0,1962	-0,1149	-0,5192
IC9	0,8918	-0,1910	-0,5606	0,3556
IC10	0,3137	-0,3545	-0,2905	0,7631
IC11	-0,3755	0,4253	0,4942	0,3920
IC12	0,3766	-0,4459	0,5245	-0,5578
NC5	0,8576	-0,7263	-0,0865	0,9533
NC6	-0,9751	0,0373	0,8383	-0,4643
NC7	0,1870	0,0424	-0,1257	0,4823
NC8	-0,0914	0,5227	-0,5248	-0,7619
NC9	0,5120	0,8618	0,4132	0,1483
NC10	0,6932	0,2181	-0,4567	0,3479
NC12	-0,8809	-0,3843	-0,6270	0,1298
OLC4	0,2998	0,7413	0,7455	0,5151
OLC5	-0,3490	-0,5277	-0,6895	-0,6778
OLC6	-0,7020	0,3207	0,6959	-0,7147
OLC7	-0,0049	-0,4422	0,4993	-0,8136
OLC8	-0,0780	-0,6595	0,8078	0,2560
OLC9	-0,0700	0,2401	0,9186	-0,8935
OLC10	-0,1564	-0,6501	-0,0536	0,8709
OLC11	0,4798	-0,2499	0,5506	-0,3918
OLC12	-0,5910	-0,4084	0,4688	0,7761
OLC13	0,0766	-0,2827	-0,4458	0,7458
OLC14	-0,2626	0,3722	0,2472	-0,5652
OLC15	0,2071	0,2481	0,2844	-0,4199
OLC16	0,1476	0,3480	-0,5689	-0,1605

TABELA 3.9 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T₅₀) - REDE COMPLEXA.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL				conclusão
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	
OX2	-0,1699	-0,2830	-0,4144	-0,6403	
OX3	0,3494	0,3337	0,4854	-0,5739	
OX4	0,7005	0,4171	-0,1079	0,6484	
PC3	0,4612	-0,8106	-0,4971	0,6017	
PC4	-0,9605	0,4849	-0,5822	-0,0918	
PC5	0,3774	0,2123	0,2625	0,7505	
PC6	-0,6253	0,6316	-0,4387	1,1582	
PC7	0,2297	0,8210	0,0845	0,4841	
PC8	0,3960	-0,4300	-0,1438	-0,2346	
PC9	-0,4515	0,0547	-0,8148	0,8076	
PC10	0,7168	-0,6331	0,7209	0,7319	
PC11	-0,9762	-0,8451	-0,4538	-0,1816	
PC12	-0,2070	1,0091	-0,1946	-0,0771	
PC13	0,3643	-0,6591	0,1974	0,6209	
PC14	-0,1290	-0,8017	0,5153	-0,3550	
PC15	0,0923	-0,8496	0,5004	-0,5898	
PC16	-0,7860	0,1294	0,5239	-0,9618	
DC5	-0,8479	-0,8668	-0,5695	-0,3776	
DC6	0,7887	0,6206	0,8900	0,5848	
DC7	-0,0291	0,3518	-0,3696	-0,5341	
DC8	-1,1007	0,6709	-0,2740	-0,3326	
DC9	0,0423	0,7924	-0,8556	0,1725	
DC10	0,9412	0,5219	-0,9777	-0,9470	
DC11	-0,6390	-0,6808	-0,3169	-0,8402	
DC12	0,9182	0,7920	0,5116	0,2008	
DC13	0,7928	-0,7034	-0,5167	0,8923	
Bias de entrada	0,4235	0,7681	-0,1239	-0,9102	
Saída cam. oculta	0,1418	-0,0729	-0,1466	-0,1210	
Bias oculto	0,4161	-	-	-	

TABELA 3.10 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{50}) - REDE SIMPLES.

continua

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL					
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6
Aromáticos	4,1959	-2,3229	0,3284	-10,4744	-6,0251	-7,8104
Isoparafinas	-4,9478	-9,4903	10,1797	2,6311	-4,3921	-6,1896
Naftênicos	0,4700	-9,5627	7,9122	-2,7939	-5,8277	1,3076
Olefinas	-5,7285	4,7745	1,1396	-7,4063	-8,0545	-0,9490
Oxigenados	6,9416	0,5483	2,9527	-1,9025	-7,7329	-5,6230
Parafinas	7,5578	-2,9086	1,5255	-2,2655	-5,2871	-4,6730
Desconhecidos	-2,5067	-1,5489	0,2315	-5,6762	-3,7695	6,3945
Bias de entrada	-5,7784	5,9436	-15,0724	11,9227	15,7762	3,8492
Camada oculta	1,5771	0,0476	1,2522	-0,4452	1,2863	-0,0371
Bias oculto	0,5157	-	-	-	-	-

TABELA 3.10 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{50}) - REDE SIMPLES.

conclusão

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL					
	Neurônio 7	Neurônio 8	Neurônio 9	Neurônio 10	Neurônio 11	Neurônio 12
Aromáticos	7,2989	5,0099	6,4433	0,9469	-7,9786	6,2803
Isoparafinas	-1,3863	-0,2647	4,8431	-3,4089	-1,9421	-2,8274
Naftênicos	-4,4081	5,5217	0,0837	-4,6157	-2,8506	3,8266
Olefinas	-3,1443	-1,7764	-3,5810	-9,5935	-4,1060	-7,9626
Oxigenados	-6,5058	-4,6199	3,2888	5,3333	5,6357	-0,5898
Parafinas	6,4070	-6,6508	-8,5311	-7,5530	-1,7088	-7,8402
Desconhecidos	-2,2604	5,5736	0,8613	0,3179	-7,6895	-2,2279
Bias de entrada	-2,7782	-6,2766	-5,1580	5,3529	5,9925	2,5158
Camada oculta	-0,2158	0,0735	0,3082	0,1259	-1,3860	-0,4338
Bias oculto	-	-	-	-	-	-

TABELA 3.11 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{90}) - REDE COMPLEXA.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL				
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5
AC10	0,1798	0,3578	0,8365	-0,9889	-1,3297
AC11	0,0923	-1,2995	-0,0530	-0,7412	0,6412
AC12	0,3471	-1,2938	1,1834	0,8003	0,9549
AC13	0,8358	-0,1769	-0,4927	0,0274	0,1636
AC14	0,8662	0,7974	-0,0366	0,8068	-0,1220
AC15	-1,0600	0,2275	0,5081	0,5069	1,1089
C14	0,8460	0,6638	1,0276	1,3583	-0,0917
C15	0,3745	0,7812	-0,1007	0,0933	-0,8375
IC9	-1,2517	-0,7139	-1,0802	-0,9417	-0,4430
IC10	0,9288	-0,4464	-0,7566	1,1213	-1,2929
IC11	0,2461	0,2232	0,4235	-0,4843	-0,7188
IC12	-0,3314	-0,3773	0,4519	1,1815	-0,4881
NC8	0,2055	-1,0044	-0,8803	-0,5629	-0,1638
NC9	-0,0703	1,1321	-0,7118	-0,0171	-0,2907
NC10	1,0160	-0,5326	1,0610	1,0241	-1,2686
NC12	0,8676	1,1068	0,9630	1,2106	-0,8753
OLC10	0,5281	1,0026	-0,3509	0,3691	0,2472
OLC11	-1,6942	1,2619	1,1433	0,5441	-0,2180
OLC12	0,9789	0,5725	-0,8296	1,3035	-1,3744
OLC13	-0,7433	-0,9836	-0,2856	-0,4030	0,9678
OLC14	1,0775	-0,6121	-1,2223	-1,2736	0,1258
OLC15	0,7638	0,8055	0,4274	-0,6358	-0,9106
OLC16	1,2144	2,7980	2,1561	2,8405	-1,1680
OX2	-0,7857	0,3526	-0,9538	-0,8210	-0,5003
PC10	0,4667	-0,9826	-0,7840	0,4453	-0,5147
PC11	-0,7043	0,7261	1,2165	-1,0044	-1,1484
PC12	-1,3010	-0,7107	1,0858	-0,9897	0,2000
PC13	-0,8022	-0,5905	0,5532	0,1259	1,0055
PC14	-0,6275	0,6127	1,2002	0,2414	0,8257
PC15	0,8172	-0,2229	0,5923	-0,8773	1,0480
PC16	-14,7492	10,1779	4,5406	-13,0569	-17,0642
DC10	-0,7528	1,2766	1,2688	-0,7105	1,0889
DC11	0,5784	-1,1148	0,3169	-0,2385	-0,8045
DC12	-1,1185	-1,0698	-1,3074	0,8547	-1,3521
DC13	1,2249	-0,3108	0,6138	1,2928	-0,9945
Bias de entrada	-0,1684	-2,2018	-3,9957	0,4922	4,8561
Saída cam. oculta	-0,3413	-0,1400	0,1151	0,0666	-0,7047
Bias oculto	-0,1802	-	-	-	-

TABELA 3.12 - CURVA DE DESTILAÇÃO (T_{90}) - REDE SIMPLES.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL								
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8	Neurônio 9
Aromáticos	1,5326	4,3573	5,7138	-8,1760	9,5927	-4,4698	-0,3966	-3,4611	5,7294
Isoparafinas	10,5649	-4,0123	-7,5536	-9,0063	9,6592	8,1371	-10,1055	-3,7864	-9,3768
Naftênicos	-3,3330	-11,3666	-10,0680	-6,5351	-2,6347	6,3030	6,0656	-7,6795	4,4022
Olefinas	-2,2400	5,0555	5,4180	-7,6908	-9,3503	10,5002	10,6191	9,8378	-11,5302
Oxigenados	-6,2063	10,7767	0,4041	-9,8907	0,6503	7,9011	-7,2971	0,1551	5,4708
Parafinas	9,1628	1,9042	11,3333	0,1281	9,0059	3,1025	-7,2901	11,1399	7,9790
Desconhecidos	9,8185	-7,8796	4,8903	-5,0494	3,2402	-7,2388	2,0084	8,1378	0,5706
Bias de entrada	-15,2432	-2,2604	-6,4648	23,7985	-9,4746	-13,3544	3,1510	-9,4730	2,3564
Camada oculta	-3,0991	0,0720	0,1913	0,2159	0,1587	-2,8413	-0,3705	0,3488	0,9336
Bias oculto	-0,3819	-	-	-	-	-	-	-	-

TABELA 3.13 - CURVA DE DESTILAÇÃO (PFE) - REDE COMPLEXA.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL		
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3
AC12	0,2618	0,7158	0,5122
AC13	0,4713	0,3797	-0,0998
AC14	0,5661	-0,1896	-1,0150
AC15	0,5162	0,8490	-0,4784
C14	-0,4703	-0,6349	-0,3502
C15	0,8408	-0,2986	-0,2614
IC10	-0,8625	0,8271	-0,2493
IC11	0,8553	0,6746	-0,0712
IC12	-0,0118	-0,7200	-0,2030
NC10	-0,0572	0,6987	0,7863
NC12	-0,1640	0,6437	0,1938
OLC12	-1,0608	-0,7042	-0,0496
OLC13	-0,7544	-0,6531	-0,1614
OLC14	0,6242	-0,2770	-0,5930
OLC15	-0,0025	0,5860	-0,3718
OLC16	0,2157	-0,2348	-0,0215
PC12	-0,3199	0,8202	0,4228
PC13	0,5665	0,0367	0,3983
PC14	-1,0408	-0,6847	-0,5482
PC15	-0,2369	-0,0578	1,0617
PC16	-0,3368	-0,4935	0,2273
DC11	-0,2637	-0,4813	-0,3641
DC12	-0,4990	0,9881	0,1004
DC13	0,5963	0,2879	0,0429
Bias de entrada	0,2026	-0,8201	-0,4274
Saída cam. oculta	-0,4728	0,2502	-0,4269
Bias oculto	0,0844	-	-

TABELA 3.14 - CURVA DE DESTILAÇÃO (PFE) - REDE SIMPLES.

Variável de entrada (% v/v)	PESOS (W) REDE TREINADA - ARQUITETURA FINAL							
	Neurônio 1	Neurônio 2	Neurônio 3	Neurônio 4	Neurônio 5	Neurônio 6	Neurônio 7	Neurônio 8
Aromáticos	2,6259	-5,8863	2,6538	-3,8557	2,3458	-0,3265	-0,1035	-1,8590
Isoparafinas	-3,8959	-3,4231	0,2793	-3,8532	-8,0497	-0,1916	-3,7951	-4,6833
Naftênicos	0,0282	-1,9191	-3,0881	5,0456	-0,8907	-2,9368	5,3172	-2,3736
Olefinas	-4,4310	6,1614	-0,3961	1,1686	0,3551	5,6351	-4,3756	2,4946
Oxigenados	-3,3136	-1,4140	-4,5693	-1,6454	0,9573	-5,2391	-4,6067	-1,0634
Parafinas	-3,5550	-0,9392	-5,7216	5,4290	3,7745	1,1185	1,6713	5,3009
Desconhecidos	4,7047	-1,0701	4,2937	-1,0505	-1,8256	4,5164	-2,8175	4,6148
Bias de entrada	2,4776	4,3179	1,9953	-0,1395	1,3628	-2,2195	4,3073	-0,7009
Camada oculta	-0,0891	-0,1957	0,1151	0,0828	0,0277	-0,0463	-0,0609	0,2390
Bias oculto	0,4298	-	-	-	-	-	-	-